

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Шаповал Дмитро Юрійович

УДК 531.3, 536.9, 538.9, 544.4

ДИСЕРТАЦІЯ

КООПЕРАТИВНІ ЯВИЩА, СКЕЙЛІНГ ТА УТВОРЕННЯ СТРУКТУР У
МОДЕЛЯХ РЕАКЦІЙНО-ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ

104 — фізика та астрономія

10 — природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,
результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____ Д. Ю. Шаповал

Науковий керівник Дудка Максим Леонідович, доктор фіз.-мат. наук

Львів — 2022

АНОТАЦІЯ

Шаповал Д. Ю. Кооперативні явища, скейлінг та утворення структур у моделях реакційно-дифузійних процесів. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 — Фізика та астрономія. — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2022.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню впливу локальних флуктуацій концентрації реагуючих речовин та транспортних властивостей реагентів на зміну законів скейлінгу у реакційно-дифузійних процесах, а також впливу неоднорідних властивостей каталізатора на рівноважну поведінку утворених адсорбатів. Для досягнення поставленої мети було розв'язано декілька задач.

Спочатку досліджено зміну скейлінгу при переході між дифузійно-обмеженим, характерним для одновимірних систем, та реакційно-обмеженим, характерним для багатовимірних систем, кооперативними режимами у реакційно-дифузійних системах. Такий перехід аналізується шляхом порівняння універсальної поведінки односортного коагуляційно-дифузійного процесу зі стохастичним скиданням на великих часах на одновимірному ланцюжку та ґратці Бете. На цей випадок за допомогою наближення бен-Аврагама-Ґлассера було поширено добре вивчений для одновимірних систем метод порожніх інтервалів, у якому в неперервній границі поведінка моделі описується скейлінговою змінною λ , зокрема $\lambda \rightarrow 0$ відповідає випадку ланцюжка, а $\lambda \rightarrow \infty$ — ефективно багатовимірній системі. Знайдено логарифмічні поправки до скейлінгу густини частинок при $\lambda \rightarrow \infty$, а також розраховано перехідні скейлінгові функції та ефективні критичні показники.

Для того щоб дослідити вплив локальних флуктуацій реагуючих речовин та транспортних властивостей реагентів на зміну законів скейлінгу у флуктуаційно-домінуючій дифузійно-обмеженій системі, було розглянуто двосортну систему рухомих частинок-пасток, що можуть взаємно анігілювати або коагулювати, у той

час як частинки-мішені можуть адсорбуватись частинками-пастками. Аномальна дифузія частинок обидвох сортів моделюється далекосяжними стрибками – польотами Леві (випадкові блукання, в яких довжина кроку описується розподілом ймовірностей з “товстим хвостом”). Система розглядається у дифузійно-обмеженому режимі, який досягається для просторової вимірності нижче верхньої критичної $d < d_c$. Вимірність d_c для досліджуваної системи визначається контролюючим параметром далекосяжних стрибків. Для дослідження скейлінгової поведінки такої двосортної системи використано метод теорети-польової ренормалізаційної групи. Розраховано універсальні нетривіальні показники для скейлінгової поведінки густини та кореляційної функції густина-густина частинок-мішеней у однопетлевому наближенні. При заміні просторової вимірності на ефективну (залежну від контролюючого параметру розподілу Леві) отримані показники можна пов’язати з аналогічними виразами для випадку звичайної дифузії, подібно до того як це спостерігається для критичної поведінки систем із далекосяжними взаємодіями. В одновимірному випадку отримані аналітичні результати для показника часового загасання густини частинок-мішеней підтверджені методом комп’ютерного експерименту.

Для дослідження впливу неоднорідних властивостей каталізатора на рівноважну поведінку утворених адсорбатів, що фомуються в процесі каталітично-активованих реакцій задачу було розглянуто в одновимірному та ефективно багатовимірному випадках. При цьому структура каталітичної підкладки, яка часто не є точно визначеною геометрично, розглядалась як множина рухомих або локалізованих випадково розподілених каталітичних вузлів або зв’язків між вузлами.

У першій задачі досліджуються рівноважні властивості адсорбату, що формується в процесі каталітично-активованих реакцій $A + B \rightarrow \emptyset$ у двосортній системі на ланцюжках із каталітичними елементами (зв’язки між вузлами – модель I та вузли – модель II), що розміщені випадково за сценарієм відпаленого (каталітичні елементи в рівновазі із системою) та замороженого (каталітичні елементи локалізовані) безладів. У випадку одновимірних ланцюжків для обох типів каталітичних елементів та для обох типів безладу знайдено точні розв’язки. У випадку

відпаленого безладу для моделей I та II отримано точні вирази для усередненої за безладом великої канонічної статистичної суми, а отже, для тиску адсорбату та його термодинамічних похідних. У випадку замороженого безладу проблему усереднення логарифма великої канонічної статистичної суми розв'язано двома підходами. У першому підході задача зводиться до комбінаторного перерахунку усіх можливих повністю каталітичних кластерів із фіксованим положенням каталітичних зв'язків або вузлів і знаходження точних виразів для статистичних ваг таких кластерів. У другому підході задача переписується у термінах спін-1 моделі. В результаті це дозволило представити усереднений за безладом тиск як усереднений логарифм сліду нескінченного добутку випадкових матриць розмірності 3×3 , взаємно нескорельованих для моделі I та парно скорельованих у випадку моделі II. Знайдені точні розв'язки є нетривіальними прикладами нескінченного добутку випадкових матриць, для яких показник Ляпунова може бути розрахований у явному вигляді.

У другій задачі досліджуються рівноважні властивості адсорбату у такій двосортній системі на псевдоґратках Бете (глибоко всередині дерева Кейлі) та Фушімі (глибоко всередині дерева Фушімі). В цій задачі ми розширюємо модель I та вважаємо, що частинки одного й того ж сорту при зустрічі на сусідніх вузлах взаємодіють одна з одною. Для двох типів псевдоґраток для симетричного випадку з рівними хімічними потенціалами частинок обох сортів та однаковою взаємодією частинок одного й того ж сорту отримано повну фазову діаграму двокомпонентного адсорбату. Показано, що фазова діаграма досить складна та складається з декількох фаз: фаза зі спонтанно порушеною симетрією між частинками різних сортів, в якій вони присутні з різними середніми густинами; симетрична фаза, в якій частинки присутні при однакових густинах, а переходи між цими фазами можуть бути як першого роду, так і неперервні. Більш того, через свою дводольну природу на ґратці Бете існують дві додаткові фази із структурним впорядкуванням (система спонтанно розділяється на дві підґратки з різним покриттям частинками на кожній з підґраток), натомість на ґратці Фушімі такі фази відсутні через більш сильні фрустраційні ефекти.

Ключові слова: реакційно-дифузійний процес, скейлінг, стохастичне скидання, кросовер, польоти Леві, ренормалізаційна група, відпалений безлад, заморожений безлад, переходи лад-безлад та порушення симетрії, ґратка Бете, ґратка Фушімі

ABSTRACT

Shapoval D. Yu. Cooperative phenomena, scaling and structure formation in models of reaction-diffusion processes. — 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, 2022.

The thesis is devoted to the study of the influence of local fluctuations in the reactant concentration and reactant transport properties on the change in scaling laws in reaction-diffusion processes, as well as the influence of heterogeneous properties of the catalyst on the equilibrium behavior of the formed adsorbates. Achieving the set goal, several problems were solved.

First, the change in scaling at the crossover between diffusion-limited, characteristic for one-dimensional systems, and reaction-limited, characteristic for high-dimensional systems, cooperative regimes in reaction-diffusion systems was investigated. Such a crossover is analyzed by comparing the universal behavior of a single-species coagulation-diffusion process with stochastic reset at large times on a one-dimensional chain and a Bethe lattice. For this case, the well-studied empty-interval method for one-dimensional systems was extended using the ben-Avraham-Glasser approximation, in which the model behavior in the continuum limit is described by the scaling variable λ , in particular, $\lambda \rightarrow 0$ corresponds to the case of a chain, and $\lambda \rightarrow \infty$ is effectively a high-dimensional system. Logarithmic corrections to the scaling of the particle-density at $\lambda \rightarrow \infty$ were found, as well as the crossover scaling functions and the effective critical exponents were calculated.

The study of the influence of local fluctuations in the reactant concentration and reactant transport properties on the change in scaling laws in a fluctuation-dominated diffusion-limited system, a two-species system of mobile trap-particles that can mutually annihilate or coagulate, while target-particles can be adsorbed by traps was considered. Anomalous diffusion of particles of both species is modeled by

long-range jumps – Lévy flights (random walks in which the step length is described by a probability distribution with a “fat tail”). The system is considered in the diffusion-limited regime, which is achieved for the space dimension below the upper critical one $d < d_c$. The dimensionality d_c for the system under study is determined by the control parameter of long-range jumps. The field-theoretic renormalization group method was used to study the scaling behavior of such a two-species system. Universal non-trivial exponents for the scaling behavior of the density and the density-density correlation function of target-particles in the one-loop approximation were calculated. When replacing the space dimension with an effective one (that depend on the control parameter of the Lévy distribution), the obtained exponents can be related to similar expressions for the case of the ordinary diffusion, just as it is observed for the critical behavior of systems with long-range interactions. In the one-dimensional case, the obtained analytical results for the density decay exponent of target-particles are confirmed by the numerical simulations.

To study the influence of catalyst heterogeneous properties on the equilibrium behavior of the adsorbates formed in the process of catalytically activated reactions, the problem was considered in one-dimensional and effectively high-dimensional cases. At the same time, the structure of the catalytic substrate, which is often not precisely defined geometrically, was considered as a set of mobile or localized randomly distributed catalytic sites or bonds between sites.

In the first problem, the equilibrium properties of the adsorbate formed in the process of catalytically activated reactions $A + B \rightarrow \emptyset$ in a two-species system on chains with catalytic elements (bonds between sites – model I and sites – model II), placed randomly according to the annealed disorder scenario (catalytic elements in equilibrium with the system) and quenched one (catalytic elements localized) are investigated. In the case of one-dimensional chains, exact solutions were found for both types of catalytic elements and for both types of disorder. In the case of annealed disorder for models I and II, exact expressions for the disorder-averaged grand canonical partition function and, therefore, for the adsorbate pressure and its thermodynamic derivatives were obtained. In the case of quenched disorder, the

problem of averaging the logarithm of a grand canonical partition function is solved by two approaches. In the first approach, the problem is reduced to a combinatorial enumeration of all possible completely catalytic clusters with a fixed position of catalytic bonds or sites and finding exact expressions for the statistical weights of such clusters. In the second approach, the problem is rewritten in terms of the spin-1 model. As a result, this made it possible to represent the disorder-averaged pressure as the averaged logarithm of the trace of an infinite product of random 3×3 matrices, mutually uncorrelated for the model I and pairwise correlated in the case of the model II. The found exact solutions are non-trivial examples of an infinite product of random matrices for which the Lyapunov exponent can be calculated in an explicit form.

In the second problem, the equilibrium properties of the adsorbate in such a two-species system on the Bethe (deep inside the Cayley tree) and Hushimi (deep inside the Hushimi tree) pseudolattices are investigated. In this problem, we extend model I and consider that the same species may interact with each other when they meet at neighboring sites. For two types of pseudolattices, for the symmetric case with equal chemical potentials of both species and the same interaction of the same species, a full phase diagram of the two-component adsorbate was obtained. It is shown that the phase diagram is quite complex and consists of several phases: a phase with spontaneously broken symmetry between particles of different types, in which they are present with different average densities; a symmetric phase in which particles are present at the same densities, and the transitions between these phases can be both first-order and continuous. Moreover, due to its bipartite nature, two additional phases with structural ordering exist on the Bethe lattice (the system spontaneously splits into two sublattices with different particle coverage on each of the sublattices), whereas on the Hushimi lattice, such phases are absent due to stronger frustration effects.

Keywords: reaction-diffusion process, scaling, stochastic resetting, crossover, Lévy flights, renormalisation group, annealed disorder, quenched disorder, order-disorder transitions and symmetry breaking, Bethe lattice, Husimi lattice

Список публікацій здобувача

1. *Shapoval D., Dudka M., Durang X., Henkel M.* Crossover between diffusion-limited and reaction-limited regimes in the coagulation–diffusion process // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2018. — Vol. 51, no. 42. — P. 425002.
2. *Shapoval D., Dudka M., Bénichou O., Oshanin G.* Equilibrium properties of two-species reactive lattice gases on random catalytic chains // *Phys. Rev. E.* — 2020. — Vol. 102. — P. 032121.
3. *Shapoval D., Dudka M., Bénichou O., Oshanin G.* Binary lattice-gases of particles with soft exclusion: exact phase diagrams for tree-like lattices // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2021. — Vol. 54, no. 38. — P. 385003.
4. *Shapoval D., Blavatska V., Dudka M.* Survival in two-species reaction-diffusion system with Lévy flights: Renormalization group treatment and numerical simulations // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2022. — Vol. 55, no. 45. — P. 455002.
5. On the crossover between diffusion-limited and reaction-limited particle systems / D. Shapoval, M. Dudka, X. Durang, M. Henkel // “Різдвяні дискусії 2018”, Кафедра теоретичної фізики, Львівський національний університет ім. І. Франка, Тези доповідей — Львів, Україна, 27–30 січня 2018. — С. 8
6. On the crossover between diffusion-limited and reaction-limited particle systems / D. Shapoval, M. Dudka, X. Durang, M. Henkel // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Тези доповідей.— Львів, Україна, 7–8 червня 2018. — С. 44
7. On the crossover between diffusion-limited and reaction-limited particle systems / D. Shapoval, M. Dudka, X. Durang, M. Henkel // 43-st International Conference “Middle European Cooperation in Statistical Physics” (MECO43), Abstracts. — Krakow, Poland, 1–4 May 2018. — P. 95
8. Two-species reactive lattice gases on random catalytic chains: Annealed versus

- quenched disorder / M. Dudka, D. Shapoval, G. Oshanin, O. Bénichou // XIX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Тези доповідей.— Львів, Україна, 13–14 червня 2018. — С. 34
9. Two-species reactive lattice gases on random catalytic chains: Annealed versus quenched disorder / M. Dudka, D. Shapoval, G. Oshanin, O. Bénichou // The 5th Conference “Statistical Physics: Modern Trends and Applications” (StatPhys2019) Dedicated to the 110th anniversary of the birth of M.M. Bogolyubov, Abstracts. — Lviv, Ukraine, 3–6 July 2019. — P. 151
 10. Equilibrium properties of two-species reactive lattice gases on random catalytic chains and hierarchical lattices / D. Shapoval, M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin // International conference “Modern Problems of Solid State and Statistical Physics”, Abstracts. — Kyiv, Ukraine, 14–15 September 2020. — P. 28
 11. Equilibrium properties of binary reactive adsorbate on random catalytic recursive lattices / D. Shapoval, M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin // XX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Тези доповідей.— Львів, Україна, 15–16 жовтня 2020. — С. 28
 12. Binary mixtures of particles with soft exclusion: Exact phase diagrams for tree-like lattices / D. Shapoval, M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin // 46-st International Conference “Middle European Cooperation in Statistical Physics” (MECO46), Abstracts. — Riga, Latvia, 11–13 May 2021. — P. 49
 13. Скейлінг у моделях реакційно-дифузійних процесів та утворених структур у неоднорідних середовищах / Д. Шаповал // XXI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Тези доповідей.— Львів, Україна, 11–12 жовтня 2021. — С. 14
 14. Two-species reaction-diffusion system with Lévy flights / D. Shapoval,

V. Blavatska, M. Dudka // 13th Workshop on current problems in physics, Abstracts. — Lviv, Ukraine, 26-27 October 2021. — P. 21

15. Long-range hops in a two-species reaction-diffusion system: renormalization group and numerical simulations / D. Shapoval, V. Blavatska, M. Dudka // XII Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics”, Abstracts. — Kyiv, Ukraine, 21-22 December 2021. — P. 4

ЗМІСТ

Вступ		15
1	Огляд літератури	25
1.1	Реакційно-дифузійні процеси	25
1.2	Асимптотична поведінка реакційно-дифузійних систем на великих часах	28
1.2.1	Аномальна дифузія та польоти Леві	31
1.2.2	Стохастичне скидання	32
1.2.3	Методи дослідження дифузійно-обмежених процесів	34
1.3	Каталітично-активовані реакції та реактивний ґратковий газ	37
2	Перехід між дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим кооперативними режимами у коагуляційно-дифузійному проце- сі зі стохастичним скиданням	44
2.1	Модель	44
2.2	Стаціонарна поведінка зі скиданням	53
2.3	Поведінка залежна від часу	57
2.3.1	Густина	58
2.3.2	Інтегральна густина	61
2.4	Скейлінг переходу у коагуляційно-дифузійному процесі між одно- вимірним ланцюжком та ґраткою Бете	62
2.5	Висновки до розділу	66
3	Задача про виживання частинок у двосортній реакційно-	

дифузійній системі	69
3.1 Керуючі рівняння	69
3.2 Теорія поля	72
3.2.1 Ренормалізація	76
3.2.2 Наближення Смолюховського	78
3.3 Ренормгрупові результати	80
3.3.1 Густина частинок-мішеней	80
3.3.2 Кореляційна функція густина-густина частинок-мішеней	85
3.4 Комп'ютерний експеримент у одновимірному випадку	88
3.5 Висновки до розділу	92
4 Рівноважні властивості адсорбатів, які утворені в ході каталітично-активованих реакцій	94
4.1 Рівноважні властивості двосортних реактивних ґраткових газів на випадкових каталітичних ланцюжках	94
4.1.1 Моделі каталітично-активованих реакцій $A + B \rightarrow \emptyset$ на ланцюжках з різними структурними елементами	94
4.1.2 Модель з каталітичними зв'язками (модель I)	97
4.1.3 Модель з каталітичними вузлами (модель II)	111
4.1.4 Усереднений за безладом тиск, густина та стисливість двосортного адсорбату	121
4.2 Бінарні ґраткові гази частинок з м'яким виключенням: точні фазові діаграми для деревовидних ґраток	129
4.2.1 Модель ґраткового газу частинок з м'яким виключенням	129
4.2.2 Ґратка Бете	131
4.2.3 Ґратка Фушімі	148
4.3 Висновки до розділу	156
Висновки	158
Список використаних джерел	162

А Деталі деяких виведень та обчислень для одновимірних ланцюжків	194
А.1 Модель І: Каталітичні зв'язки	194
А.2 Модель ІІ: Каталітичні вузли	205
Б Деталі деяких виведень та обчислень для ґраток Бете та Фушімі	208
Б.1 Ґратка Бете	208
Б.2 Ґратка Фушімі	213
В Список публікацій здобувача	218
Г Апробація результатів дисертації	221

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

- HT — нерухома точка,
нерухомі точки
- PG — ренормалізаційна група
- RLG — reactive lattice gases, реактивні ґраткові гази
- PAO — phase with an alternating order, фаза зі змінним порядком
- PBS — phase with a broken symmetry, фаза з порушеною симетрією

ВСТУП

Опис кооперативних ефектів у сильно взаємодіючих системах багатьох частинок продовжує залишатись цікавою та актуальною задачею. Зокрема, це стосується різноманітних систем багатьох взаємодіючих агентів, які можна описати в термінах реакційно-дифузійних процесів. Такі моделі можуть описувати кінетику хімічних реакцій, динаміку населення в екології, поширення епідемій, обмін думками в соціології або аналіз фондового ринку в економіці і т.п. [1].

В колективній динаміці таких реакційно-дифузійних систем виділяють два кооперативні режими: реакційно-обмежений (транспортні властивості реагентів та флуктуаційні ефекти не відіграють помітної ролі) та дифузійно-обмежений (на кінетику впливають як транспортні властивості реагуючих речовин, так і флуктуаційні ефекти) [2, 3]. Ці два режими на великих часах характеризуються різними степеневими залежностями (законами скейлінгу), що описують часову зміну реагуючих агентів. Кінетика реакційно-обмежених систем є добре зрозумілою, оскільки може бути успішно проаналізована за допомогою реакційно-дифузійних рівнянь у термінах макроскопічного закону діючих мас (середньо-польовий опис). Натомість, у дифузійно-обмеженому режимі, коли просторова вимірність нижча за деяку критичну, локальність процесів викликає появу великомасштабних неоднорідностей, навіть коли початковий стан є однорідним, що робить середньо-польовий опис кінетики недійсним [2–4]. Таким чином, реакційно-дифузійні системи в низьких вимірах вже впродовж багатьох років залишаються своєрідним випробувальним майданчиком, що покращує та розвиває наше розуміння флуктуаційних ефектів у складних нерівноважних системах.

Однак більшість моделей фізичної хімії чи хімічної кінетики розглядають реакційно-дифузійні процеси в простих умовах, наприклад в ізотропному середо-

вищі чи при малих концентраціях реагуючих агентів. Якщо ж наблизити модельні системи до реальності, то потрібно врахувати зокрема зміну температури, густини реагуючих речовин чи навіть агрегатний стан або особливості середовища, що в результаті впливає як на протікання самих реакцій, так і на їх швидкість. Як наслідок кінетика реакційно-дифузійних процесів стає багатшою та сприяє появі якісно нової поведінки порівняно зі спрощеними моделями, зокрема реакційно-дифузійна система може коливатись навколо точки стаціонарності (наприклад, реакції Белоусова — Жаботинського чи Брігса — Раушера) або ж з'являється така характерна особливість як утворення структур чи патернів (наприклад, структури Тюрінга чи кільця Лізеґанга) [5–11].

Більш того, існує певний клас реакцій, які можуть протікати тільки в присутності деякого каталізатора, а самі реагенти залишатись хімічно неактивними. Протягом останніх десятиліть було досягнуто значного прогресу у розумінні особливостей такого класу реакцій. З одного боку, отримано багато відповідей чому і як конкретні каталітичні субстрати сприяють реакціям між хімічно неактивними агентами, а з іншого — досліджені різні аспекти динаміки адсорбованої фази та виявлено суттєво іншу поведінку порівняно з попередніми передбаченнями: за певних умов можуть мати місце такі колективні явища як фазові переходи та утворення біфуркаційних структур [12–15]. Однак рівноважні властивості таких реакцій менш вивчені і розуміння стану рівноваги досі залишається досить обмеженим.

Актуальність теми.

Відколи Мар'ян Смолюховський показав на дуже спрощеній моделі, що макроскопічні явища дифузії можна пояснити в мікроскопічному масштабі броунівським рухом частинок [16], реакційно-дифузійні системи стали областю інтенсивних досліджень у багатьох галузях, зокрема у нерівноважній статистичній фізиці. Особливо багато досліджень присвячено кінетиці реагуючих речовин у дифузійно-обмежених системах [17, 18]. Тому для спрощених моделей (наприклад, односортний коагуляційний чи анігіляційний процеси) отримано багато точних розв'язків при розмірності простору $d = 1$ та навіть при $d = 2$ (див. наприклад

модель воутера [19]). Точний розв'язок для одновимірних систем можна отримати за допомогою багатьох підходів та технік, зокрема, методом порожніх інтервалів [20], відображаючи на квантові спінові ланцюжки (див. наприклад [21]), систему вільних ферміонів (див. наприклад [22]) чи пов'язуючи реакційно-дифузійну систему з одновимірною моделлю Ізінга та динамікою Глаубера (див. наприклад [23]) тощо. Однак для складніших систем потрібно розробляти допоміжні методи, зокрема для довільних вимірностей простору d . Вже на прикладі спрощених систем переконуємось, що реакційно-дифузійні системи в різних просторових вимірностях характеризуються різними законами скейлінгу: вище верхньої критичної вимірності вони перебувають в реакційно-обмеженому режимі та нижче критичної вимірності – в дифузійно-обмеженому.

Для розуміння ефектів флуктуацій у низькорозмірних реакційно-дифузійних системах було запропоновано різні наближення та підходи (наприклад, наближення Смолюховського) [2, 3]. Хоча такі підходи здебільшого передбачають правильний закон скейлінгу, проте все ж можуть давати некоректні результати та відрізнятися від очікуваних правильних для деяких окремих випадків (наприклад, не відтворювати точні результати для одновимірних систем). Більш того, залишається незрозумілим як покращити такі наближення систематично. Тому в останні роки все більше досліджень таких процесів показують користь теоретико-польових методів при аналізі флуктуаційно-домінуючого режиму. Оскільки на поведінку системи значною мірою впливають і транспортні властивості реагуючих речовин, то актуальним залишається як розвиток теоретико-польових методів, так і дослідження дифузійно-обмежених систем, коли дифузія реагуючих речовин є аномальною, зокрема у неоднорідних чи фрактальних системах [2, 24].

Не менш цікавим, аніж дослідження реакційно-дифузійних систем у різних режимах (вимірностях) є знаходження так званого кросоверу (зміни скейлінгу) між цими режимами, оскільки такі переходи спостерігають на експериментах, наприклад, для систем екситонів [25]. Варто зазначити, що попередні теоретичні дослідження такого переходу [26] здаються проблематичними із декількох при-

чин: не забезпечується плавний перехід від ефективно багатовимірної ґратки до одновимірного ланцюжка; скейлінгові функції є неуніверсальними; попередні теоретичні дослідження передбачають динамічний показник таким, що визначає балістичне перенесення на ефективно багатовимірній ґратці, а не дифузійний рух окремих частинок.

Окрім дослідження кінетики реакційно-дифузійних систем, важливим не тільки на академічному рівні залишаються питання про рівноважні властивості кінцевого продукту реакцій, наприклад, у т.з. каталітично-активованих реакціях. Зокрема, багато фізико-хімічних процесів, що становлять інтерес для хімічної промисловості, залежать від реакцій, що відбуваються тільки у присутності певного каталізатора. Велика частина досліджень, в яких використовувався підхід статистичної фізики до моделювання таких реакцій, розглядає каталітичний субстрат з гомогенними властивостями (каталізатор розглядається як ідеальна поверхня) і тільки в декількох роботах піднімається питання про те, як просторова неоднорідність каталізатора впливає на поведінку системи. Більш того, ці роботи досліджують обмежену кількість окремих випадків, так що загальне розуміння в даний час відсутнє.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами темами. Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України. Представлені в дисертації результати отримані згідно з планами робіт в рамках бюджетних тем НАН України: “Розвиток теоретичних методів опису флюїдних, ґраткових та складних систем поблизу точок фазового переходу” (2013-2017 рр., номер держреєстрації 0112U007763), “Нові концепції статистичного опису і їх застосування у теорії багаточастинкових систем” (2017-2021 рр., номер держреєстрації 0117U002093); проєктів НАН КПКБК: № 6541030 “Методи і моделі статистичної фізики для опису виникнення структур і скейлінгу в складних системах” (2018-2022 рр.), № 6541230 “Самоорганізація і утворення структур у м'якій речовині: аналітичні підходи і комп'ютерні симуляції” (2020-2021 рр.), №6541230 “Емерджентність у м'якій речовині: моделі та застосування” (2022 р.); проєкту FP7 EU IRSES № 612707 “Динаміка складних систем і динаміка в складних системах” (DI-

ONICOS) (2014-2017 рр.) та гранту НАН України в рамках наукових проєктів дослідницьких лабораторій/груп для молодих вчених НАН України “Макромолекулярні утворення як складні системи: комп’ютерне моделювання та аналітичні підходи” (2022 р., номер держреєстрації 07/01-2022(4)).

Мета і задачі дослідження.

Об’єктами дослідження є реакційно-дифузійні системи та реактивні ґраткові гази у одновимірному та багатовимірних випадках.

Предметом дослідження є кооперативна поведінка однокомпонентних та двокомпонентних реакційно-дифузійних систем на великих часах, а також рівноважні термодинамічні властивості адсорбату, що формується під час реакцій на неоднорідних каталітичних підкладках.

Метою роботи є дослідити вплив локальних флуктуацій реагуючих речовин та їх транспортних властивостей на зміну законів скейлінґу, які описують реакційно-дифузійні системи; з’ясувати вплив неоднорідних просторових каталітичних властивостей на рівноважну поведінку утворених адсорбатів.

Завданням роботи є:

- дослідити зміну скейлінґу при переході між дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим режимами, розглядаючи реакції коагуляції зі стохастичним скиданням [2, 27–29];
- дослідити методами теорії поля універсальні характеристики двосортної реакційно-дифузійної системи, де дифузія частинок є аномальною [4, 30];
- дослідити рівноважні властивості реакцій типу $A + B \rightarrow \emptyset$ на ґратках (одновимірний та багатовимірні випадки), структурні елементи яких володіють каталітичними властивостями випадковим чином [31–34].

Методи дослідження. У роботі використовується метод порожніх інтервалів, теоретико-польова ренормалізаційна група з використанням методів теорії збурень; методи рекурентних співвідношень; чисельні методи.

Наукова новизна отриманих результатів.

Здійснено опис кросоверу між дифузійно-обмеженим та реакційно-

обмеженим режимами, розглядаючи однокомпонентний коагуляційно-дифузійний процес на ґратці Бете та застосовуючи метод стохастичного скидання. Зокрема встановлено, що на відміну від передбачень теорії середнього поля, поведінка моделі характеризується логарифмічними поправками.

Вперше отримано показники часового загасання густини та кореляційної функції густина-густина частинок-мішеней у реакційно-дифузійній системі з частинками-пастками, що можуть коагулювати або взаємно анігілювати, а дифузія частинок двох сортів є аномальною (типу польотів Леві). У рамках теоретико-польової ренормалізаційної групи встановлено, що принаймні в однопетлевому наближенні ці показники пов'язані з аналогічними виразами для випадку звичайної дифузії, при заміні просторової вимірності на ефективну. Підтверджено результат для показника загасання густини методом комп'ютерного експерименту.

Вперше отримано точні результати для тиску та його термодинамічних похідних для адсорбату, що формується в процесі каталітично-активованих реакцій у двосортній системі на ланцюжках із каталітичними елементами, що розміщені випадково за сценарієм відпаленого та замороженого безладів.

Вперше отримано точні фазові діаграми для бінарних реактивних ґраткових газів на деревовидних ґратках Бете та Фушімі з каталітичними зв'язками, що розміщені випадково за сценарієм відпаленого безладу та взаємодіючими частинками одного й того ж сорту.

Практичне значення отриманих результатів.

Отримані в дисертаційній роботі аналітичні та чисельні результати сприяють глибшому розумінню особливостей кооперативної поведінки систем, що включають реакційно-дифузійні процеси. Зокрема, ці результати покращують розуміння флуктуаційних ефектів та особливостей дифузійного процесу у таких системах. Більш того, проведені у дисертаційній роботі дослідження сприяють глибшому розумінню рівноважних властивостей кінцевого продукту реакцій при наявності неоднорідно розподіленого каталізатора та можуть бути основою для подальшого вивчення такого класу систем.

Особистий внесок здобувача. Постановка завдань здійснювалась науко-

вим керівником дисертаційної роботи доктором фізико-математичних наук Максимом Леонідовичем Дудкою. Особистий внесок автора дисертації у спільних публікаціях:

- розрахунок стаціонарної густини та перехідних (кросоверних) скейлінгових функцій і ефективних критичних показників при переході між дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим кооперативними режимами у коагуляційно-дифузійному процесі зі стохастичним скиданням [35];
- розрахунок густини та кореляційної функції густина-густина для частинок-мішеней у задачі про виживання у середовищі з рухомими пастками, де дифузія частинок моделюється польотами Леві [36];
- розрахунок тиску адсорбату (та його термодинамічних похідних), що формується у двокомпонентних реакціях на випадкових каталітичних ланцюжках із каталітичними зв'язками або вузлами, розміщеними випадково типу відпаленого та замороженого безладів [37];
- побудова точних фазових діаграм для двокомпонентних ґраткових газів на деревовидних ґратках Бете та Фушімі з каталітичними зв'язками, що розміщені випадково за сценарієм відпаленого безладу [38].

Апробація результатів дисертації. Основні результати дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на наступних наукових конференціях: XVIII, XIX, XX, XXI Всеукраїнські школи-семінари і конкурси молодих вчених зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини (Львів, 2018, 2019, 2020 та 2021 рр.), Різдвяні дискусії на кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету ім. І. Франка (2018 р.), МЕСО43: 43-st Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Krakow, Poland, 2018), StatPhys2019: the 5th Conference “Statistical Physics: Modern Trends and Applications” dedicated to the 110th anniversary of the birth of M.M. Bogolyubov (Lviv, Ukraine, 2019), International conference “Modern Problems of Solid State and Statistical Physics” (Kyiv, Ukraine, 2020), МЕСО46: 46-st Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Riga, Latvia, 2021), 13th Workshop on current problems

in physics (Lviv, Ukraine, 2021), XII Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics” (Kyiv, Ukraine, 2021), а також на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України та Лабораторії статистичної фізики складних систем ІФКС НАН України.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 15 наукових праць, з них: 4 статті у фахових наукових виданнях, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science [35–38] та у 11 тезах конференцій.

Структура та обсяг дисертації.

Дисертаційна робота складається зі вступу, розділу з оглядом літератури та трьох оригінальних розділів, у яких викладені результати досліджень здобувача, загальних висновків, списку використаних джерел, 2 додатків, 47 рисунків та 1 таблиці. Робота викладена на 161 сторінці (повний обсяг разом з літературою та додатками – 223 сторінок), бібліографічний список містить 269 найменувань публікацій у наукових виданнях.

У **Вступі** обґрунтовано актуальність досліджуваних задач дисертаційної роботи та сформульовано мету і завдання роботи, визначено наукову новизну та практичне значення отриманих результатів, наведений особистий внесок здобувача та стисло характеристику дисертаційної роботи.

У **першому розділі** здійснено огляд робіт, присвячених дослідженню особливостей реакційно-дифузійних процесів та їх кінетики, а також здійснено опис моделей рівноважної статистичної фізики, за допомогою яких можна досліджувати властивості рівноважної поведінки продукту реакцій.

У **другому розділі** досліджується односортний коагуляційно-дифузійний процес частинок, що можуть дифундувати на ґратці, а при зустрічі двох частинок відбувається реакція коагуляції. Тут досліджується перехід між дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим кооперативними режимами у коагуляційно-дифузійному процесі зі стохастичним скиданням. Оскільки дифузійно-обмежений процес є характерним для одновимірних систем, а реакційно-обмежений, у свою чергу, характерний для багатовимірних, задача розглядається на нескінченно вимірній ґратці Бете, яка для кількості найближчих су-

сідів $q = 2$ вироджується у одновимірний ланцюжок, а для $q > 2$ може описувати багатовимірну ґратку. На цей випадок за допомогою наближення бен-Аврагама-Ґлассера поширюється метод порожніх інтервалів. У розділі розраховуються перехідні скейлінгові функції та ефективні критичні показники. Показано, що на відміну від передбачень теорії середнього поля, поведінка моделі на ґратці Бете характеризується логарифмічними поправками. Така особливість не спостерігалась у попередніх дослідженнях критичної поведінки систем на ґратці Бете. Розділ завершується висновками. Результати цього розділу опубліковано у роботі [35].

У **третьому розділі** увагу зосереджено на реакційно-дифузійній системі та розглядається двосортна задача про виживання частинок-мішеней у середовищі з рухомими пастками, де аномальна дифузія частинок моделюється польотами Леві. У цьому розділі поширюється підхід теоретико-польової ренормалізаційної групи (РГ) на досліджувану реакційно-дифузійну систему та розраховуються в однопетлевому наближенні густина та кореляційна функція густина-густина частинок-мішеней. Тут же, поряд з аналітичними розрахунками, у одновимірному випадку розглядається комп'ютерний експеримент для такої системи. Критичні показники, розраховані за допомогою комп'ютерного експерименту кількісно добре співвідносяться із РГ передбаченням. Розділ завершується висновками. Результати цього розділу опубліковано у роботі [36].

Четвертий розділ присвячений дослідженню рівноважних властивостей реактивних ґраткових газів на ґратках з каталітичними елементами та проаналізовано вплив просторової неоднорідності каталізатора. Розділ складається з двох підрозділів, що відокремлює одновимірний та багатовимірний випадки: досліджено рівноважні властивості двокомпонентних адсорбатів у ході двосортних реакцій $A + B \rightarrow \emptyset$, що протікають на одновимірних каталітичних ланцюжках та псевдоґратках Бете і Фушімі. У випадку одновимірних ланцюжків розглянуто два типи каталітичних елементів: каталітичні зв'язки (модель I) та каталітичні вузли (модель II). Більш того, розглянуто два типи безладу: відпалений та заморожений безладу у просторовому розподілі каталітичних елементів. Для обох типів

каталітичних елементів та для обох типів безладу знайдено точні розв'язки. У задачі двох псевдоґраток розглядається випадок, коли частинки одного й того ж сорту відчують взаємодію найближчих сусідів, яка може бути або відштовхувальною, або притягальною, а взаємодія між сусідніми частинками різних сортів є відштовхувальною, що природньо виникає у присутності спеціальних каталітичних зв'язків з випадковим відпаленим просторовим розподілом. Для двох типів псевдоґраток отримано повну фазову діаграму такого реактивного ґраткового газу для симетричного випадку з рівними хімічними потенціалами частинок обох сортів та однаковою взаємодією частинок одного й того сорту. Показано, що фазова діаграма досить складна та містить декілька фаз. На ґратці Бете знайдено дві додаткові фази, які відсутні у випадку ґратки Фушімі через більш сильні фрустраційні ефекти. Розділ завершується висновками. Результати цього розділу опубліковано у роботах [37, 38].

Дисертаційна робота завершується **Основними положеннями дисертації**, **Списком використаних джерел** та **Додатками**.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

У цьому розділі подається огляд основних робіт, які присвячені особливостям реакційно-дифузійних процесів, їх кінетиці та властивостям рівноважної поведінки продукту реакцій. У першому підрозділі ми в загальних рисах описуємо реакційно-дифузійні процеси та окреслюємо вужчий їх клас, який є об'єктом дослідження дисертаційної роботи. У наступному підрозділі здійснено опис асимптотичної поведінки реакційно-дифузійних систем, особливостей дифузійного руху, на який може вплинути, зокрема, складна структура систем чи природній механізм “перезапуску” (стохастичне скидання) та розглянуто основні методи дослідження дифузійно-обмеженого процесу. Останній підрозділ присвячений огляду рівноважних моделей статистичної фізики, за допомогою яких можна описати властивості адсорбату, що формується у процесі каталітично-активованих реакцій.

1.1. Реакційно-дифузійні процеси

Дослідження складних взаємодіючих систем є сферою інтересів усіх галузей науки, починаючи з фізики та хімії і закінчуючи екологією та навіть економікою чи соціологією. Причиною є те, що більшість природних систем є складними системами: від хімічних реакцій, які підтримують життя до епідемічних спалахів, від функціонування мозку до поведінки популяцій тварин, від динаміки молекул в рідині та атмосфері до коливань на біржових ринках [1, 2, 39, 40]. Спільною рисою у таких різних дисциплінах є наявність складної та багатой поведінки, викликаної динамікою локально взаємодіючих та просторово розподілених агентів, яку мо-

жна описати в термінах реакційно-дифузійних процесів. В найбільш загальному розумінні в таких процесах відбувається зміна концентрації однієї або декількох хімічних речовин чи агентів нехімічної природи у просторі та часі: локальні реакції, де хімічні речовини чи агенти перетворюються один в одного, у той час як дифузія змушує їх поширюватися (з області з високою концентрацією в область з нижчою). Приклади таких процесів можна відшукати у багатьох дисциплінах та на різних масштабах: від мікроскопічних взаємодій молекул у масштабах клітин до екологічних чи епідемічних явищ у масштабах цілого континенту [1, 2, 39, 41].

Однією із яскравих особливостей реакційно-дифузійних процесів є поява за певних умов просторових чи часових патернів [7, 8]. Зокрема, більш як 80 років тому було передбачено, що деякі конкретні типи хімічних реакцій, які знаходяться далеко від стану термодинамічної рівноваги, можуть проявляти такі нелінійні властивості як самоорганізація [5–8]. Спочатку було запропоновано гіпотезу, що в певних типах хімічних реакцій дифузія може спонукати до часткового розділення реагуючих речовин [5]. Однак згодом Алан Тюрінг передбачив, що в деяких хімічних реакціях структура може спонтанно виникати з початкового однорідного розчину [6]. На молекулярному рівні така поведінка виникає внаслідок поєднання процесів реакції та дифузії, а утворені структури складаються з періодичних коливань концентрації реагентів. Такі структури називають структурами Тюрінга або дисипативними структурами. Зокрема термін отримав таку назву у роботах Пригожина [7, 8], де розглядалися задачі по розсіюванні хімічної енергії, яка забезпечує термодинамічну рушійну силу для самоорганізації. В таких процесах важливу роль відіграють нелінійність та зовнішні обмеження, які керують системою, що знаходиться далеко від термодинамічної рівноваги. І таким чином, при зміні керуючих параметрів в системі можуть спостерігатись різні перехідні явища, зокрема біфуркація, коли у деякий критичний момент плавна зміна значень параметрів системи викликає раптову зміну в її поведінці – система може розгалужитись між динамічними шляхами, що ведуть до самоорганізованих станів різної морфології [7, 8].

У дисертаційній роботі ми досліджуватимемо вужчий клас таких реакційно-

дифузійних процесів, які були запропоновані для опису особливостей широкого спектру нерівноважних систем багатьох взаємодіючих агентів, а саме опис колективної поведінки точкових агентів, які здійснюють броунівську (або аномальну) дифузію в просторі та стохастично взаємодіють (локально) з іншими агентами згідно з попередньо визначеними правилами (вони можуть взаємно анігілювати чи коагулювати при зустрічі, можуть спонтанно народжуватись чи давати потомство тощо). В літературі часто такі процеси називають стохастичними реакційно-дифузійними процесами [42, 43]. Гнучкість та простота, яку забезпечують правила локальної взаємодії, призвела до широкого застосування такого класу моделей у численних наукових дисциплінах, зокрема, де досліджують просторово-часову поведінку. Такі моделі природним чином знаходять застосування у багатьох галузях хімії (колоїдна хімія, динаміка аерозолів, каталіз і фізична хімія розчинів) чи у фізиці та хімії конденсованого стану [40]. Зокрема в рамках такої моделі можна описати нерівноважну критичну поведінку системи: це і кінетика екситонів в напівпровідниках, і взаємодія доменних стінок у магнетиках чи динаміка в моделях росту тощо [1–3, 40, 44, 45]. Також за допомогою таких моделей описують динамічні процеси навіть нехімічної природи, наприклад, динаміку популяцій в екології чи магнітних монополів у ранньому Всесвіті в космології, конкуренцію бактеріальних колоній у мікробіології, торгівлю акціями на фондовому ринку в економіці, обмін думками або вуличні заворушення, які досліджуються в рамках соціологічних досліджень чи епідемічні явища [1–3, 41, 46–51].

Такий спрощений підхід до реакційно-дифузійних процесів дозволив розв'язати чимало задач точно, хоча і здебільшого в одному вимірі та з односторонніми реакціями, наприклад, процеси анігіляції $A + A \rightarrow \emptyset$, де \emptyset позначає хімічно нейтральний елемент, який не бере участі у реакції [52, 53] або коагуляції $A + A \rightarrow A$ [52–54]. Навіть такі прості реакції виявляють широкий спектр поведінки, яка характерна для нерівноважної кінетики, зокрема, самоорганізація, утворення структур чи кінетичні фазові переходи [24]. Точний розв'язок для одновимірних реакційно-дифузійних систем можна отримати за допомогою, наприклад, методу порожніх інтервалів [20], відображаючи на квантові спінові ланцюжки [21]

або на систему вільних ферміонів [22]. Хоча вже зараз досягнутий значний прогрес у дослідженні таких реакційно-дифузійних процесів, однак більшість моделей не можуть бути розв'язані точно [4, 55]. Тому необхідно використовувати різні наближення, щоб описати їх основні властивості. Деякі з них обговоримо у наступних підрозділах, а тут лише згадаємо коротко. Найстарішим наближенням є закон діючих мас, де швидкість реакції двох реагентів вважається пропорційною добутку їхніх концентрацій [2, 3]. Такий середньо-польовий підхід є виправданим, якщо дифузія (дифузійне змішування) частинок є набагато сильнішою, ніж вплив кореляцій, які продукуються реакціями. Середньо-польові методи були успішно застосовані до великої кількості реакційно-дифузійних систем, зокрема для дослідження утворення патернів чи структур в нелінійних реакційно-дифузійних моделях [56]. Однак, як було показано ще Смолюховським [16] флуктуації можуть бути надзвичайно важливими в системах низької вимірності. Окрім цього і сам дифузійний процес може бути аномальним, що також впливає на кінетику реакційно-дифузійних процесів. Ці аспекти розглянемо у наступному підрозділі.

1.2. Асимптотична поведінка реакційно-дифузійних систем на великих часах

Як ми згадували у підрозділі вище, в реакційно-дифузійних процесах відбувається гра двох параметрів: дифузії реагуючих агентів та локальних хімічних реакцій. Такі процеси протікають за характерний час: дифузійний час τ_{diff} – типовий час, протягом якого дві довільні частинки можуть зустрітись та час реакції τ_{reac} – типовий час, протягом якого дві довільні частинки реагують, коли вони знаходяться на достатньо близькій відстані одна від одної, у межах діапазону реакції [2]. І залежно від того як співвідносяться ці характерні часові масштаби, в колективній динаміці розрізняють два кооперативні режими: реакційно-обмежений та дифузійно-обмежений [1–3].

В границі $\tau_{diff} \ll \tau_{reac}$ реакційно-дифузійний процес уповільнюється відносно великим часом реакції, а характерні часові масштаби кінетики будуть ви-

значатися швидкостями реакцій. Такий режим називається реакційно-обмежений або реакційно-контрольований і він є характерним для багатовимірних систем. Під час такого процесу частинки можуть входити в діапазон реакцій багато разів, перш ніж вони насправді прореагують. Тобто частинки може пробувати великі об'єми резервуара перед реакцією, і тому ефективно реагують на глобальну концентрацію інших частинок. В такому режимі реакційно-дифузійну систему можна вважати однорідною, а отже, вплив локальних флуктуацій концентрації реагентів чи їх транспортних властивостей на кінетику є несуттєвий. Така задача відносно проста і може бути розв'язана за допомогою класичних середньо-польових рівнянь [2]. Зокрема, на рівні середньо-польового опису можна показати, що при вимірності простору $d > d_c$, де d_c – критична вимірність, типовою є наступна поведінка на великих часах [46]:

$$\rho(t) \sim t^{-\alpha_{MF}}, \text{ де } \alpha_{MF} \simeq 1. \quad (1.1)$$

У протилежній границі $\tau_{diff} \gg \tau_{reac}$ будь-які реакції вимагають, щоб принаймні дві частинки були поруч і тому стають рідкісними та обмежуються дифузійним процесом. Тому такий режим називають дифузійно-обмежений або дифузійно-контрольований і він є характерним для низьковимірних систем. Під час такого процесу частинки реагують при першій же зустрічі і тому на кінетику значною мірою впливають локальні флуктуації концентрації реагуючих речовин, а також особливості самого дифузійного процесу. Кінетика стає аномальною і більше не можна покладатися на класичний середньо-польовий опис, де використовуються глобальні концентрації, а потрібен інший підхід. Зокрема, у випадку простої реакції (наприклад, односортна реакція анігіляції) поведінка густини реагуючих агентів на великих часах характеризується наступними степеневими залежностями при $d \leq d_c = 2$:

$$\rho(t) \sim \begin{cases} t^{-\alpha}, \text{ де } \alpha = d/2 & d < 2, \\ t^{-1} \ln t & d = 2. \end{cases} \quad (1.2)$$

Таким чином, густина загасає більш повільно, аніж у середньо-польових передбаченнях $\rho(t) \sim t^{-1}$ при всіх $d \leq d_c = 2$. В таблиці 1.1 ми наводимо результати

Матеріал	α	Посилання	
C ₁₀ H ₈	0.52 – 0.59	Prasad and Kopelman (1989)	[57]
P1VN/PMMA	0.47(3)	Kopelman <i>et al.</i> (1990)	[58]
TMMC	0.48(4)	Kroon <i>et al.</i> (1993)	[59]
NiPco нанотрубки	0.5	Russo <i>et al.</i> (2006)	[60]
CoMoCAT	0.5	Srivastava and Kono (2009)	[61, 62]
NiPco нанотрубки	0.51(3)	Allam <i>et al.</i> (2013)	[25]

Табл. 1.1. Експериментальне вимірювання показника загасання α середньої густини частинок $\rho(t) \sim t^{-\alpha}$ для дифузійно-обмеженої кінетики екситонів у ефективно $1D$ системах.

експериментальних досліджень, де аномальна кінетика дифузійно-обмежених реакцій спостерігалася для ефективно одновимірних систем. Показник загасання α виявляється близьким до точного результату (системи в яких переважають флуктуації) $\alpha = 1/2$ і далекий від значення, яке очікується в середньо-польовому описі $\alpha_{MF} = 1$.

Багато реакцій можуть бути добре зрозумілими на рівні класичних кінетичних рівнянь. Однак багато інших фізичних систем можуть бути описані лише як дифузійно-обмежені. Прикладами є електронно-діркова рекомбінація в напівпровідниках, злиття молекулярних збурень в легованих полімерах, реакція електронних збурень в легованих матрицях, реакції, що відбуваються у в'язких розчинниках, гетерогенний каталіз, а також спінова динаміка в моделі Ізінґа при нульовій температурі тощо [1, 2].

Отож, в колективній динаміці реакційно-дифузійних процесів виділяють два режими, які на великих часах характеризуються різними законами скейлінґу, що описують часову зміну реагуючих агентів: реакційно-обмежений режим, на який не особливо впливають флуктуаційні ефекти та транспортні властивості реагуючих речовин та дифузійно-обмежений, кінетика якого чутлива як до локальних флуктуацій, так і до особливостей дифузійного процесу, який може бути аномальним, якщо середовище фрактальне або має низьку вимірність [1, 2, 39, 63, 64]. В такому контексті, також цікаво дослідити інший клас задач, в яких на властивості дифузійного руху впливає стохастичне скидання [65–69], що сьогодні мо-

жна відтворити на експерименті [70, 71]. Такі особливості дифузійного процесу у реакційно-дифузійних системах розглянемо далі.

1.2.1. Аномальна дифузія та польоти Леві

Хоча зазвичай в нерівноважних моделях розглядається звичайна дифузія, складна структура деяких систем може приводити до немарківської поведінки (див., наприклад, [2, 24]), порушуючи закон лінійного зростання середньоквадратичного зміщення з часом t :

$$\langle r^2 \rangle \sim t^\alpha \quad \text{з } \alpha \neq 1, \quad (1.3)$$

тоді як $\alpha = 1$ для нормальної дифузії. Приклади такої аномальної дифузії частинок можна знайти у фізиці високоенергетичної плазми та турбулентності, старінні склоподібних матеріалів чи в пористих середовищах, в біологічних (наприклад, аномальна дифузія в клітинній мембрані чи схеми пошуку їжі у тварин) та соціально-економічних процесах (наприклад, подорожі людини чи поширення епідемій), а також у різних реакційно-дифузійних системах. Теоретичний опис таких процесів передбачає нові фізичні та математичні властивостей, зокрема суб- та супердифузію, розподіли ймовірностей з нескінченними моментами, аномальна релаксація в складних системах або субдифузійно- та супердифузійно-обмежені реакції [24, 72–75].

Аномальну дифузію можна змоделювати, використовуючи ідею польотів Леві [2]. Такі польоти можна представити як випадкові блукання з дискретними довжинами стрибків, які підкоряються розподілу ймовірностей з товстими хвостами. На кожному часовому кроці частинка стрибає з довжиною r , який вибирається з розподілу Леві

$$\hat{p}_L(r) \sim r^{-d-\sigma} \quad (1.4)$$

з контролюючим параметром $0 < \sigma \leq 2$ і просторовою вимірністю d . У цьому випадку середньоквадратичне зміщення зростає як $\alpha = 2/\sigma$. Варто зазначити,

що часто в літературі такий супердифузійний рух називають польотами Леві, не конкретизуючи його особливостей [75], хоча для конкретної мети дослідження потрібно розрізняти польоти Леві та блукання Леві. Статистика польотів Леві часто може призводити до розбігання середньоквадратичного зміщення (нескінченна швидкість), що звісно є нефізичним аспектом. У той же час, в моделі аномальної дифузії, що називається блуканням Леві, кожен дискретний час для здійснення стрибка певного розміру вважається пропорційним цьому розміру і тому частинки мають скінченну швидкість [75–77].

Польоти Леві знайшли широке застосування для опису багатьох процесів, що відбуваються в природі [78–83] включаючи нелінійну динаміку, зокрема хаотичну дифузію у джозефсонівських контактах [84, 85], потокові транспортні властивості [86], динаміку частинок у періодичних потенціалах [87] або турбулентних потоках [88–90]. Крім того, такі супердифузійні випадкові процеси використовувалися для опису біологічних систем, зокрема аномальної дифузії в живих полімерах [91], а також дифузію у системах зв'язування білків [92], поширення епігенетичних знаків (епі-знаків) на великі відстані вздовж геному [93]. Польоти Леві використовувалися для опису лазерного охолодження холодних атомів [94] та спектральних флуктуацій у випадкових лазерах [95–97] або поширення світла в оптичних матеріалах із домішками (так зване Леві-скло) [98, 99], в оптимізації стратегії пошуку [100–104]. За аналогією зі звичайними польотами Леві були також введені “часові” польоти Леві, коли рух частинок характеризується алгебраїчно розподіленим часом очікування [105, 106].

1.2.2. Стохастичне скидання

“*Іноді краще просто все кинути і почати спочатку*” – цитата з оглядової статті “*Stochastic resetting and applications*” Мартіна Еванса, Саті Маджумдара та Грегорі Шера [69], яка чи не найкраще висвітлює природний механізм “перезапуску” у фізиці, хімії, біології, комп’ютерних науках, екології, економіці тощо: раптове переривання процесу з наступним його запуском. З моменту перших ро-

біт Еванса та Маджумдара [65–68], де вони розглянули дифундуючу частинку, яка демонструє якісно нову поведінку під впливом стохастичного скидання (наприклад, появу нерівноважного стаціонарного стану та цікаву динаміку релаксації [65, 66, 68, 107–110]), було проведено велику кількість досліджень присвячених концепції стохастичного скидання та його застосуванню [69]. Зокрема вони охоплюють стохастичні алгоритми пошуку та їх оптимізацію (зокрема, стохастичне скидання перезапускає процес пошуку та може призвести до скорочення його часу) [67, 111–117], стохастичні комп’ютерні алгоритми [118, 119], стохастичну термодинаміку [107] чи квантову механіку [120, 121]. Більш того концепцію стохастичного скидання можна відшукати у дослідженнях, які присвячені процесам полімеризації РНК [122, 123], реакційно-дифузійним процесам [29], системам з польотами Леві [111, 124–126], а також не менш цікавим системам, які проявляють колосальні крахи (“перезавантаження”), наприклад фондові ринки [127] чи динаміка популяцій [128–130] або ж моделюючи катастрофічні події [131]. І хоча більшість робіт є теоретичними, в останні роки з’являються також і експериментальні дослідження стохастичного скидання в контрольованому середовищі, зокрема нещодавна експериментальна реалізація дифузії колоїдних частинок і скидання за допомогою голографічного пінцету [70] чи експерименти з броунівською частинкою, яка за допомогою оптичного пінцету скидається двома протоколами (періодичний та випадковий час скидання) [71].

Однак у більшості робіт по стохастичному скиданню об’єктом дослідження є або одна частинка, або невзаємодіюча система. Тому природньо розглянути вплив стохастичного скидання на статичні чи динамічні властивості взаємодіючих систем багатьох тіл, зокрема вплив скидання на стаціонарний стан такої системи. В такому ключі, наприклад, досліджувались нерівноважний стаціонарний стан моделі Ізінга для вимірності простору d [132] та в одновимірному випадку система взаємодіючих броунівських частинок [108], процеси виключення [133, 134] чи коагуляційно-дифузійний процес [29]¹, а також обговорювався оптимальний

¹Цікаво, що коагуляційно-дифузійний процес зі стохастичним скиданням можна реалізувати у контексті експериментів з кінетики екситонів [25, 58–61]: такий процес можна відтворити за допомогою лазера, повторно

час пошуку у переповненому (crowded) середовищі [112, 113, 124]. На відміну від одночастинкової задачі, де броунівська частинка скидається до початкового чи деякого фіксованого положення, у багаточастиноковій задачі стохастичне скидання повертатиме всю систему до початкової конфігурації. Наприклад в одновимірній задачі про коагуляційно-дифузійний процес [29], де частинки здійснюють випадкові стрибки по найближчим сусіднім вузлам, а під час зустрічі двох частинок одна з них зникає, стохастичне скидання описуватиметься заданим набором ймовірностей знайти послідовні порожні вузли, а, отже, уся система скидатиметься до такої конфігурації з певною ймовірністю. У цьому випадку стохастичне скидання також переводить систему у нерівноважний стаціонарний стан. Однак тут варто зауважити: як зазначають автори статті [135], застосовність підходу стохастичного скидання для багаточастинкової взаємодіючої системи є обмеженою та працює лише із “глобальним скиданням” (скидання до початкової конфігурації). Проте, для таких системи більш природньо стохастичне скидання має нести локальний характер, на який також може впливати взаємодія. Однак зараз відсутня єдина теоретична основа для досліджень “локального” стохастичного скидання у системі багатьох взаємодіючих агентів.

Відмінною рисою стохастичного скидання є його здатність прискорювати процеси, зокрема він може зменшити як середній час першого проходження (the mean first-passage time) дифундууючої частинки, яка досягла або певної межі, або цілі [65, 70, 71, 112, 113], так і середній час виконання стохастичних комп’ютерних алгоритмів [118, 119]. Таким чином, стохастичне скидання є корисним інструментом для регулювання завершення стохастичних процесів та динамічних систем [69].

1.2.3. Методи дослідження дифузійно-обмежених процесів

Вплив локальних флуктуацій та транспортних властивостей реагуючих речовин у реакційно-дифузійних системах для вимірностей простору нижче кри-

заселяючи з деякою регулярною швидкістю ланцюжок та не дозволяючи частинкам зникати перед заповненням системи.

тичної та при критичній було досліджено багатьма методами, зокрема можна згадати наступні: формалізм локальної густини частинок та її флуктуації [136], наближення слабо взаємодіючого неідеального бозе газу [137, 138], а також наближення типу Смолюховського [17, 18, 137, 139] та підхід теоретико-польової ренормалізаційної групи (РГ) [1, 4, 140], який, зокрема, пропонує потужні методи для систематичного аналізу асимптотичної поведінки реакційно-дифузійних моделей на великих часах. Останні два підходи розглянемо детальніше.

Підхід Смолюховського

Одним із методів, які широко використовуються для дослідження флуктуаційних ефектів у різних реакційно-дифузійних системах для вимірностей нижче критичної та при критичній, є теорія Смолюховського, яка у свою чергу, є основою стандартної хімічної кінетики [16–18]. Основна ідея підходу Смолюховського – це пов'язати константи реакції та константи дифузії, припускаючи, що частинки взаємодіють одна з одною на певній фіксованій відстані (див., наприклад, [139, 141–143]). Для кількох простих реакційно-дифузійних моделей цей підхід передбачає правильні показники загасання густини на великих часах (наприклад, для одсортої реакції анігіляції [16]), але цей підхід все ще не дозволяє кількісно обчислити амплітуди.

Як обговорюється в літературі, на відміну від середнього поля, наближення Смолюховського коректніше визначає універсальні властивості величин, що описують реакційно-дифузійну системи у дифузійно-обмеженому режимі і сам підхід є доволі простим при розрахунках. Але, незважаючи на зручність цієї теорії, такий підхід може передбачити помилкові результати для більш складної системи. Зокрема, теорія Смолюховського не дозволяє отримати правильні показники для змішаних реакцій (див., наприклад [4]). Крім того, він дає неправильні результати для добре відомих точно розв'язуваних моделей (див., наприклад, [144, 145]). Тому все частіше розробляють допоміжні методи та техніки для дослідження флуктуаційних ефектів дифузійно-обмежених процесів, які дозволяє вийти за межі наближення Смолюховського, зокрема можна згадати: ієрархію рівнянь для ба-

гаточастинкових функцій розподілу [146–148], багаторазове розсіювання (multiple scattering) [149, 150] та теоретико-польовий підхід [1, 4, 42, 140, 151].

Теоретико-польовий підхід. Ренормалізаційна група

Методи РГ, які явно розглядають поведінку фізичних спостережуваних величин при масштабних перетвореннях успішно використовуються при описі критичних флуктуацій. РГ забезпечує природну основу для пояснення виникнення критичної поведінки, появи універсальності та класифікації різних систем у термінах класів універсальності. Крім того, інструменти РГ, зокрема у поєднанні з пересумовуванням розбіжних рядів або чисельних методів, також дозволяють отримати кількісні характеристики універсальних властивостей [4]. Варто зазначити, що РГ найбільш успішно застосовується для систем поблизу термодинамічної рівноваги. Хоча багато систем у природі не можуть навіть наближено описати в рамках рівноважного підходу, велика різноманітність нерівноважних систем демонструє критичну поведінку, що дозволяє їх аналіз методами РГ [1, 4, 140]. Зокрема у випадку нерівноважних систем метод ґрунтується на введенні вторинно-квантованих операторів народження-знищення, а потім беручи до уваги відповідну неперервну границю, отримують інтеграли за траєкторіями. Починаючи з теоретико-польового формулювання задачі, стандартні механізми РГ можуть бути реалізовані для обчислення універсальних величин [4].

Таким чином теоретико-польова РГ знайшла своє застосування у багатьох системах з реакційно-дифузійними процесами. Можна згадати як прості реакції типу коагуляції $A + A \rightarrow \emptyset$ чи анігіляції $A + A \rightarrow A$, де зокрема показано, що вони належать до одного класу універсальності [152], так і узагальнення таких реакцій $kA \rightarrow \emptyset$ та $kA \rightarrow lA$, де $l < k$ з верхньою критичною вимірністю $d_c = 2/(k - 1)$ [4, 153]. В цих дослідженнях показано, що для $d \leq d_c$ і амплітуди, і показники загасання густини є універсальними та не залежать від початкових умов. Цікаві результати були отримані за допомогою РГ у задачах про галуження та анігіляцію [154, 155] чи про спрямовану перколяцію [4, 55, 156], де отримано нетривіальні скейлінгові показники, які зокрема не можна знайти в межах наближе-

ння Смолюховського. Також РГ аналіз був застосований і до складніших систем, зокрема у двосортних задачах [30, 141, 157, 158] та для реакційно-дифузійних процесів у неоднорідному середовищі, яке моделюється безладом типу Сіная [159], потенціальним полем [160] чи довгосяжно скорельованими потенціальним і соленоїдальним полями [161].

Також теоретико-польова РГ була застосована в різноманітних реакційно-дифузійних моделях з аномальною дифузією, зокрема яка моделюється польотами Леві. Можна згадати системи з односортними реакціями анігіляції [162], моделі галуження та анігіляції [163], аномальну спрямовану перколяцію [105, 164, 165], задача про злих блукачів [166]. Вимірність простору $d_c = 2$ є критичним для великої кількості різноманітних реакційно-дифузійних систем, натомість дослідження систем з польотами Леві продемонстрували, що верхня критична вимірність визначається контролюючим параметром для розподілу Леві $d_c = \sigma$.

Таким чином за останні десятиліття було досягнуто великого прогресу у розумінні флуктуаційних ефектів у реакційно-дифузійних процесах. Багато систем зараз добре зрозумілі завдяки різноманітним методам, такими як моделі середнього поля, точні розв'язки, наближення Смолюховського, чи Монте-Карло симуляції, однак особливу роль відіграє тут теоретико-польова РГ, зокрема у розумінні універсальності [4]. Тому розвиток теоретико-польових РГ методів у дослідженнях реакційно-дифузійних процесів залишається таким важливим.

1.3. Каталітично-активовані реакції та реактивний ґратковий газ

Різні явища та процеси, що відбуваються на поверхні твердих тіл, лежать в основі багатьох високотехнологічних процесів. Зокрема такі елементарні хімічні реакції як адсорбція, десорбція, поверхнева дифузія представляють великий інтерес для хімічної промисловості. Багато таких фізико-хімічних процесів залежать від реакцій, які відбуваються тільки у присутності т.з. “каталізатора”, тобто в таких реакціях частинки реагують тільки в присутності іншого агента і зали-

шаються хімічно неактивними при його відсутності. Присутність “каталізатора” забезпечує альтернативну послідовність елементарних кроків для досягнення хімічної реакції, яка не може мати місце при його відсутності. До прикладу, можна згадати розкладання перекису водню, нітрування бензолу, промисловий синтез аміаку з азоту й водню, перетворення діоксиду сірки в триоксид сірки під час синтезу сульфатної (сірчаної) кислоти тощо [167–169].

Цей вид реакцій, який ми будемо називати каталітично-активованими реакціями, привернув велику увагу спільноти науковців, які займаються статистичною фізикою після новаторської статті Ціффа, Гуларі та Баршада [12]. Автори методами Монте-Карло досліджували каталітично активовану двокомпонентну реакцію, яку можна записати у вигляді $A + B \rightarrow \emptyset$, де \emptyset – хімічно нейтральний елемент, який не бере участі у реакції (детальніше, процес окислення монооксиду вуглецю до вуглекислого газу). У такій ситуації реакція відбувається або миттєво, або з деякою кінцевою ймовірністю і обидва реагенти зникають зі системи [12, 169–174]. Автори виявили дивовижну кооперативну поведінку з подальшими фазовими переходами. Зокрема, огляди в цьому напрямку можна знайти в роботах [34, 169, 170]. Згідно з цією моделлю молекули чадного газу можуть адсорбувати на поверхню, при цьому займаючи порівняно малу площу. Натомість обидва атоми молекули кисню зв’язуються із поверхнею та дисоціюють на атомарний кисень при адсорбції (два атоми вільно вступають в реакцію незалежно один від одного із сусідніми молекулами монооксиду вуглецю). Далі утворена молекула вуглекислого газу десорбує з поверхні (не бере участі в реакції). І в такій системі, як було показано, можуть відбуватись кінетичні фазові переходи від активного стаціонарного стану до поглинаючого стану (“poisoned state”): система зазнає фазового переходу першого роду від CO -насичення неактивної фази в реактивний стійкий стан з подальшим неперервним переходом в O_2 -насичення неактивної фази [12, 169–174].

У фізиці часто використовується спрощена картина, тому такі каталітично-активовані реакції (відповідно до запропонованих в роботі Ціффа, Гуларі та Баршада [12]) можна подати як прості моделі $A + B \rightarrow \emptyset$, де \emptyset – або реакція ані-

гіляції, або хімічно нейтральний елемент, який не бере участі у реакції. Навіть з таких огрублених моделей можна дістати інформацію, зокрема в дисертаційній роботі ми більше цікавимося не як відбувається реакція, а поведінка утвореного адсорбату, подібно як було запропоновано у роботах [31, 34, 171, 172, 175–179].

Дослідження утвореного адсорбату, що формується у процесі каталітично-активованих реакцій можна описати в рамках ґраткового газу, де хімічні взаємодії між сусідніми частинками інтерпретуються як виключення найближчих сусідів. Такий клас моделей ми називатимемо “реактивні” ґраткові гази (“reactive” lattice gases, RLG). Одразу відзначимо, що незважаючи на деяку схожість, немає однозначної відповідності між моделями RLG і моделями каталітичних реакцій, які були запропоновані у роботах [12, 169–174]. Для останніх наявність незворотної реакції виводить систему з рівноваги, в той час як моделі RLG є означені у рівновазі. Значний обсяг знань про термодинамічні властивості систем, споріднених з моделями RLG, було отримано завдяки серії глибоких аналітичних та чисельних аналізів. Починаючи з ранніх робіт [180], були запропоновані різні підходи, включаючи, наприклад, кластерні розклади Майєра [181], різні роботи, що базуються на розкладах в ряди [182–187], квазіхімічні та кільцеві наближення [188], наближення ґратки Бете [189–191] тощо, досягаючи кульмінації у знаходженні точного розв’язку для моделі “жорстких шестикутників” (hard-hexagons) [192, 193]. Зовсім нещодавно точні розв’язки були знайдені для деяких випадкових графів, а також для частинок, що розрізняються за розміром [194]. Точні розв’язки на ґратці Бете були отримані для моделі з двома типами частинок – меншими частинками, які займають один вузол ґратки та більшими, які не дозволяють іншим частинкам займати сусідні вузли [195].

У моделях RLG розглядається регулярна ґратка адсорбуючих вузлів, яка знаходиться у контакті з резервуаром частинок (або декількома резервуарами, у випадку декількох типів частинок), який підтримується при постійному хімічному потенціалі. Таким чином, частинки піддаються неперервному обміну зі своїми відповідними резервуарами – вони адсорбують на вільні вузли ґратки і можуть спонтанно десорбувати з неї. Далі передбачається, що або деякі з вузлів ґратки,

або деякі зі зв'язків, що з'єднують сусідні вузли, володіють особливими каталітичними властивостями: частинки, що вступають у “реакцію”, не можуть одночасно з'являтися на сусідніх вузлах ґратки, коли або один з вузлів, або обидва є каталітичними чи ці сусідні вузли пов'язані каталітичним зв'язком. За відсутності каталізатора реактивні частинки співіснують. Це реактивне обмеження потім інтерпретується таким чином, що у рівновазі конфігурації частинок, що відповідають реакціям, дають нульовий вклад у статистичну суму, тобто є забороненими.

Коли ґратка повністю покрита каталітичними зв'язками або вузлами (каталітичний субстрат має гомогенні каталітичні властивості), RLG стає газом твердих частинок, в якому виключення найближчих сусідів між частинками, які вступають у реакцію, накладається на всю ґратку, тобто частинки не можуть займати сусідні вузли. Такі моделі добре відомі (наприклад, моделі двовимірних твердих квадратів або твердих шестикутників [193]) і показано, що в системі відбувається фазовий перехід з неупорядкованої фази у впорядковану при певному значенні хімічного потенціалу. Але при такому підході лише в декількох роботах [31, 34, 171, 172, 175–179] розглядається питання про те, як просторова неоднорідність каталізатора впливає на поведінку каталітично-активованих реакцій. Ці роботи, проте, стосувалися лише обмеженого числа окремих випадків, так що загальне розуміння в даний час відсутнє.

Для скінченної концентрації каталізатора ситуація, очевидно, більш складна і залежить також від того, як каталізатор розподіляється на ґратці. Зокрема, для RLG з каталітичними зв'язками частинка пов'язана таким зв'язком тільки з одним зі своїх сусідів і тому “ взаємодіє ” тільки з ним. І навпаки, частинка, що знаходиться на каталітичному вузлі, взаємодіє з усіма своїми найближчими сусідами, що призводить до неадитивної колективної взаємодії. Більш того коли тільки деяка частина зв'язків або вузлів є каталітичною у випадку відпаленого безладу реактивне обмеження стає менш жорстким і нескінченне відштовхування між сусідніми частинками замінюється м'яким. Як свідчить недавній аналіз на ґратці Бете [34], критична поведінка в цій ситуації стає багатшою. Зокрема, у випадку каталітичних зв'язків спостерігаються неперервні фазові переходи у не-

впорядковану фазу. У випадку каталітичних вузлів разом із неперервним фазовим переходом між впорядкованою та неупорядкованою фазами, також реалізується фазовий перехід першого роду, в залежності від концентрації каталізатора. Для обох випадків каталітичних зв'язків та каталітичних вузлів довільної середньої концентрації з випадковим відпаленим чи замороженим просторовим розподілом каталізатора були отримані точні розв'язки для одновимірних ґраток тільки для частинок одного сорту [31, 175–177].

Для односортних RLG у багатовимірних системах проблема в цілому також є нерозв'язаною і точний розв'язок існує лише для псевдоґраток – так звана ґратка Бете з відпаленим безладом у розміщенні каталітичних зв'язків або вузлів [34]. У випадку каталітичних зв'язків модель аналогічна дослідженій, наприклад, у роботі [191], за винятком того факту, що тут відштовхувальні взаємодії не є нескінченно сильними, а “м'якими” і їх амплітуда залежить від середньої концентрації каталітичних зв'язків p : вона розбігається тільки при $p \rightarrow 1$, але скінченна при будь-якому $p < 1$. Було показано, що така модель демонструє неперервний перехід від неупорядкованої до впорядкованої фази при певному значенні хімічного потенціалу; при $p \rightarrow 1$ це критичне значення збігається до отриманого у роботі [191]. За цим переходом слідує неперервний реентрантний перехід у неупорядковану фазу, яка зміщується до нескінченності, коли $p \rightarrow 1$, тобто зникає у випадку твердих об'єктів. Випадок каталітичних вузлів складніший, виникають багаточастинкові взаємодії і, як наслідок, критична поведінка дещо багатша. У той час як прямий перехід у впорядковану фазу завжди є неперервним, реентрантний перехід у неупорядковану фазу може бути або неперервним, або першого роду в залежності від значення концентрації p_s каталітичних вузлів. Критичне значення хімічного потенціалу для реентрантного переходу також зсувається до нескінченності як $p_s \rightarrow 1$.

Для RLG з двома типами частинок єдиний доступний точний розв'язок був отриманий для регулярної шестикутної ґратки (так звана стільникова ґратка, honeycomb) з випадковим відпаленим розподілом каталітичних зв'язків для спеціального випадку: хімічні потенціали обох частинок були взяті рівними один

одному (так що обидва сорти повинні бути присутніми в середньому при рівних середніх густинах) і з деякою накладеною обмежуючою умовою, що концентрація p каталітичних зв'язків і параметри взаємодії пов'язані один з одним за допомогою певного відношення. Було показано [178, 179], що в цьому окремому випадку модель зводиться до точно розв'язуваної моделі Блюме-Емері-Гріффітса, яка відображається на модель Ізінга у нульовому зовнішньому полі [196, 197]. Розв'язок передбачає нетривіальний, викликаний флуктуаціями неперервний перехід у фазу з порушеною симетрією щодо середніх густин обох сортів частинок: при рівних хімічних потенціалах обох сортів, RLG демонструє неперервний фазовий перехід із порушеною симетрією та поступовим покриттям всієї ґратки тільки частинками певного сорту. Проте залишається нез'ясованим чи зберігається такий перехід за межами цього обмежуючого відношення між концентрацією та параметрами взаємодії або це помилкове явище, яке виникає виключно через такі обмеження.

Щоб з'ясувати це питання можна використати наближені підходи, зокрема підхід псевдоґраток. У минулому розумілося (див., наприклад, роботу [191]), що різні наближені підходи, такі як, наприклад, підхід Бете-Пайерлса або інші наближення, фактично відповідають заміні реальної регулярної ґратки деякою псевдоґраткою. У той же час аналіз, виконаний на псевдоґратці, забезпечує більш надійне наближення і часто істотно кращий у порівнянні із середньопольовими розрахунками та зазвичай правильно визначає рід фазового переходу, якщо такий є, і дає досить точну оцінку його положенню у просторі параметрів. Підхід ґратки Бете використовувався, серед багатьох інших прикладів, для аналізу фазової діаграми моделі Блюме-Емері-Гріффітса [198, 199], модульованих фаз, що виникають в моделі Ізінга з конкуруючими взаємодіями [200], моделі Поттса [201], у ґраткових моделях склоподібних систем [202] та при дослідженні локалізованих переходів [203], а також фазової поведінки іонних рідин [33, 204]. Підхід ґратки Бете також використовувався при аналітичних дослідженнях різних реакційно-дифузійних процесів [205, 206], процесів випадкової та кооперативної послідовної адсорбції [207] або структурних властивостей розгалужених полімерів [208, 209]. Точність такого наближення була нещодавно оцінена у чисельному аналізі моделі

Блюме-Капеля та було показано, що, вона забезпечує дуже точну оцінку положення кривої розмежування між впорядкованою та невпорядкованою фазами [210]. З іншого боку, підхід ґратки Бете не може повністю відтворити геометричні фрустрації у випадку наявності деяких конкурентних взаємодій. Щоб врахувати ефекти фрустрації і, таким чином, більш адекватно описати систему, розробляються більш складні версії, в яких кожна вершина замінюється фрустрованою геометричною одиницею. Якщо взяти такою геометричною одиницею трикутник, результуюча структура буде деревом Фушімі. Аналіз різних фізичних моделей на таких псевдоґратках досить поширений і з'являється у різних фізичних контекстах. Згадаємо лише нещодавні дослідження антиферромагнітних класичних [211, 212] та квантових спінових моделей [213], а також моделей з багатовузловими взаємодіями [214].

РОЗДІЛ 2

ПЕРЕХІД МІЖ ДИФУЗІЙНО-ОБМЕЖЕНЕНИМ ТА РЕАКЦІЙНО-ОБМЕЖЕНЕНИМ КООПЕРАТИВНИМИ РЕЖИМАМИ У КОАГУЛЯЦІЙНО-ДИФУЗІЙНОМУ ПРОЦЕСІ ЗІ СТОХАСТИЧНИМ СКИДАННЯМ

У цьому розділі перехід між дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим кооперативними режимами у реакційно-дифузійних системах аналізується шляхом порівняння універсальної поведінки коагуляційно-дифузійного процесу на великих часах на одновимірному ланцюжку та ґратці Бете. На ланцюжку ця модель розв'язується точно методом порожніх інтервалів. Цей метод можна поширити на ґратку Бете в наближенні бен-Аврагама-Ґлассера. На ґратці Бете аналіз залежної від часу густини частинок із перетворенням Лапласа аналогічний вивченню стаціонарного стану при додаванні стохастичного скидання (ресету) до конфігурації нескорельованих частинок. У цьому стаціонарному стані знайдено логарифмічні поправки до скейлінгу, що характерно для систем при верхній критичній вимірності. Аналогічні результати справедливі для інтегрованої в часі густини частинок. Отримано кросоверні скейлінгові функції та відповідні ефективні критичні показники між ланцюжком та ґраткою Бете. Основні результати опубліковані в [35].

2.1. Модель

Тут ми досліджуватимемо перехід (кросовер) між дифузійно-обмеженим (характерно для одновимірних систем) та реакційно-обмеженим (типово для бага-

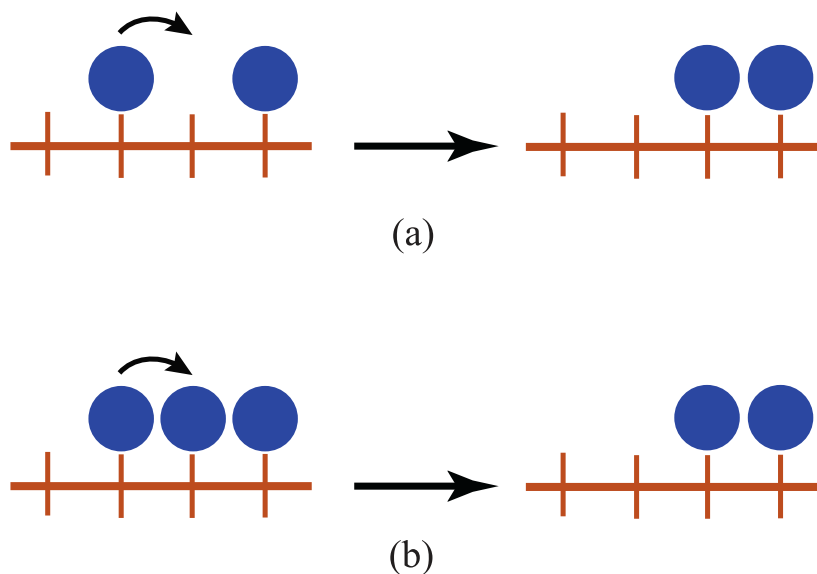


Рис. 2.1. Рух частинок під час коагуляційно-дифузійного процесу на ланцюжку: (a) дифузійний рух під час якого загальна кількість частинок не змінюється $A + \ominus \rightarrow \ominus + A$ та (b) коагуляційний рух під час якого загальна кількість частинок зменшується $A + A \rightarrow \ominus + A$.

товимірних систем) кооперативними режимами у коагуляційно-дифузійному процесі. Для цього ми порівнюємо універсальну поведінку коагуляційно-дифузійного процесу на одновимірному ланцюжку та ґратці Бете. Ясні та однозначні результати в задачах статистичної фізики отримуються в рамках точно розв'язуваних моделей. Тут ми досліджуємо коагуляційно-дифузійний процес частинок одного сорту A . Модель формулюється на ґратці, вузли якої або порожні (\ominus), або зайняті частинками (A). Динаміка моделі описується стрибками частинок. Якщо при стрибку частинка потрапляє на порожній вузол, тоді вона там і залишається. Однак, якщо вона опиняється на вже зайнятому вузлі, тоді видаляється із системи з ймовірністю одиниця. В результаті отримаємо два типи двовузлових мікроскопічних процесів, а саме дифузія $A + \ominus \rightarrow \ominus + A$ та коагуляція $A + A \rightarrow \ominus + A$ як показано на рисунку 2.1. Цей вид взаємодії найближчих сусідів може бути визначений на ґратках будь-якої просторової вимірності.

Далі ми означимо ґратку на якій ми хочемо вивчати коагуляційно-дифузійний процес. На рисунку 2.2 показано перші три генерації (покоління) дерева Кейлі [193, 215]. Дерево Кейлі створюється із центрального вузла O . У

першій генерації до вузла O прикріплені q різних сусідів. Пізніші покоління виходять індукцією з уже існуючого дерева для генерацій $\ell \geq 1$. У поколінні $\ell + 1$ кожен вузол генерації ℓ прикріплює $q - 1$ окремих сусідів, так що покоління ℓ має $q(q - 1)^{\ell-1}$ вузлів. Після ℓ генерацій загальна кількість вузлів дерева Кейлі [193]:

$$c_{\ell}^{(Cay)} = \frac{q [(q - 1)^{\ell} - 1]}{q - 2}, \quad (2.1)$$

а вузли останнього покоління – це граничні вузли дерева Кейлі. І зазвичай відношення кількості граничних до кількості внутрішніх вузлів регулярної ґратки стає малим в термодинамічній границі для великої системи, а у випадку дерева Кейлі кількість внутрішніх вузлів, так само як і кількість граничних зростають експоненційно як $(q - 1)^{\ell}$ [193]. Тому ми розглядатимемо тільки вузли розташовані глибоко всередині дерева Кейлі, тобто розглядатимемо ґратку Бете [193, 215]. Кожен вузол ґратки Бете має точно q найближчих сусідів та не містить граничних вузлів.

Окрім цього, можна показати, що дерево Кейлі є ефективно нескінченно вимірним, а, отже, характеризується “середньо-польовими” значеннями критичних показників. Якщо розглянути довільну гіперкубічну регулярну ґратку, то можна показати, що вимірність такої ґратки визначається як відношення логарифма числа вузлів, які знаходяться в межах ℓ кроків від заданого вузла $c_{\ell}^{(r.l.)} = 1 + m_1 + m_2 + \dots$, де m_1 – число найближчих сусідів, m_2 – число найближчих після найближчих сусідів, і т.д. до логарифма кількості цих кроків або поколінь ℓ :

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{\ln c_{\ell}^{(r.l.)}}{\ln \ell} = d, \quad (2.2)$$

де d – це вимірність гіперкубічної регулярної ґратки [193]. Натомість, якщо підставити в рівняння (2.2) замість $c_{\ell}^{(r.l.)}$ загальну кількість вузлів дерева Кейлі $c_{\ell}^{(Cay)}$ (2.1), ми отримаємо $d = \infty$. Отож, в цьому розумінні дерево Кейлі (як і ґратка Бете зокрема) є ефективно нескінченно вимірним.

І дерево Кейлі, і ґратка Бете широко використовуються у контексті аналітичних досліджень спінових систем та різних хімічних реакцій [26, 34, 205–207, 217–

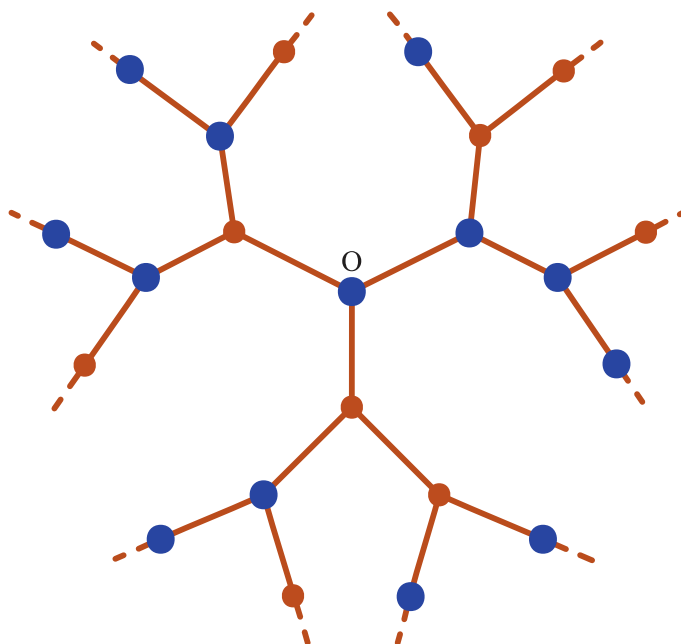


Рис. 2.2. Дерево Кейлі із $q = 3$ гілками та $\ell = 3$ поколіннями, що починаються із центрального вузла O . Вузли ґратки можуть або бути порожніми (маленькі коричневі кружечки), або бути зайняті частинками сорту A (великі сині кружечки).

223], дослідженні випадкової та кооперативної послідовної адсорбції [207, 224–226] чи галужених полімерів [208, 209].

Ми хочемо дослідити поведінку коагуляційно-дифузійного процесу на великих часах, розглядаючи задачу на ґратці Бете та порівняти результати із тими, що відомі для поведінки на одновимірному ланцюжку. Дійсно, на ланцюжку коагуляційно-дифузійний процес є дифузійно-обмеженим і може бути розглянутий точно за допомогою добре відомого методу порожніх інтервалів, введеного бен-Аврагамом, Буршкою та Дьорінгом.[2, 20]. З тих пір метод був суттєво узагальнений [27–29, 52, 227–244]. Оскільки ґратка Бете є нескінченновимірною, для моделі на ґратці Бете очікується реакційно-дифузійна поведінка. Неперервно змінюючи число найближчих сусідів q від $q = 2$ (одновимірний ланцюжок) до $q > 2$ (ґратка Бете), можна досліджувати перехід від дифузійно-обмеженої до реакційно-обмеженої поведінки на великих часах.

Метод порожніх інтервалів був наближено узагальнений для ґратки Бете [26]. Для ілюстрації, рисунок 2.2 показує частину дерева Кейлі з $q = 3$ із

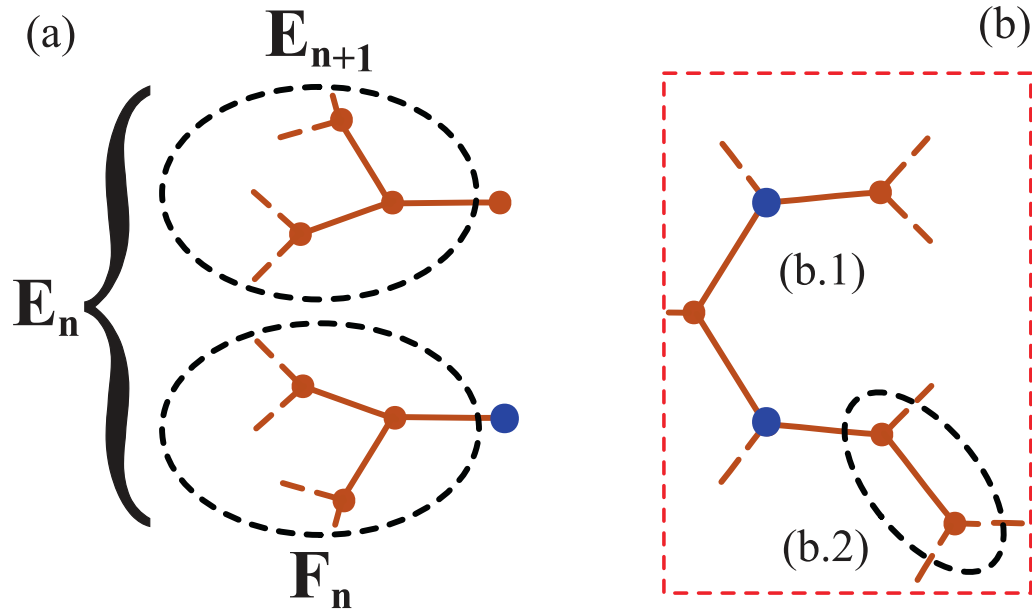


Рис. 2.3. Метод порожніх інтервалів на ґратці Бете із зайнятими (сині кружечки) та порожніми вузлами (коричневі кружечки) зі схематично зображеною ймовірністю знайти кластери з порожніми вузлами (пунктирні овали). (а) E_{n+1} – ймовірність, що зв’язаний кластер з $n + 1$ вузлами є порожнім (пунктирний овал). F_n – ймовірність, що зв’язаний кластер C_n з n вузлами є порожнім і має одного зайнятого найближчого сусіда. Якщо цей сусідній вузол з’єднаний з C_n через один зв’язок, та оскільки E_{n+1} – це ймовірність того, що порожній кластер C_n має найближчого порожнього сусіда, то $E_n = E_{n+1} + F_n$ і рівняння (2.4) справедливе. (б) Випадки із двома можливими конфігураціями 3-кластерів (червоний пунктирний прямокутник). Випадок (b.1) не можна представити так само, як і випадок (а), оскільки тут порожні вузли не утворюють зв’язаний кластер, на відміну від випадку (b.2) [26].

зайнятими та порожніми вузлами. Дотримуючись методології [26], розглядається зв'язаний кластер \mathcal{C}_n з n порожніми вузлами та визначається залежна від часу ймовірність $E_n(t)$ того, що кластер \mathcal{C}_n не містить частинок в момент часу t . Оскільки E_n змінюється тільки тоді, коли частинка стрибає в кластер, і враховуючи, що кількість сусідніх вузлів \mathcal{C}_n залежить тільки від n , а не від його форми [26, 216], $E_n(t)$ повністю описується n . Зокрема, добре відома теорема [26, 216] стверджує, що на ґратці Бете у зв'язаному кластері з n вузлів є $n(q - 2) + 2$ сусідів, незалежно від форми кластера. Окрім цього, ми означимо ймовірність $F_n(t)$ того, що зв'язаний кластер \mathcal{C}_n не містить частинок і що один із його сусідніх вузлів зайнятий. Тоді матимемо рівняння руху для всіх $n \geq 1$ [26]

$$\frac{d}{dt}E_n(t) = \frac{n(q - 2) + 2}{q} F (F_{n-1}(t) - F_n(t)), \quad (2.3)$$

із граничними умовами $E_0(t) = 1$ та $\lim_{n \rightarrow \infty} E_n(t) = 0$. Ця гранична умова виникає через те, що остання частинка в системі не може зникнути [2, 26]. Тут, F – швидкість перескоку частинки на найближчий вузол. Згідно із визначенням моделі, частинка, яка намагається застрибнути на зайнятий вузол, зникає з ймовірністю одиниця. Система рівнянь замикається наближення бен-Аврагама-Ґлассера [26]

$$F_n(t) = E_n(t) - E_{n+1}(t). \quad (2.4)$$

Рівняння (2.4) також знаходимо у [220–222]. Для $q = 2$, рівняння (2.3),(2.4) зводяться до точних рівнянь руху, отримані методом порожніх інтервалів на одновимірному ланцюжку. Для $q > 2$, рівняння (2.4) є наближенням. Однак, згідно з бен Аврагамом та Ґлассером [26], метод є точним не тільки для $q = 2$, але також для $q \rightarrow \infty$. Більше того, вони стверджують, що навіть при проміжних значеннях, таких як $q \approx 3$, наближення (2.4) також має давати хороші результати. Справедливість наближення (2.4) додатково проілюстровано на рисунку 2.3.

В якості початкового стану ми розглядаємо випадковий розподіл частинок, при якому вузол зайнятий з ймовірністю p . Тоді ймовірність знайти порожній кластер:

$$E_n(0) = (1 - p)^n, \quad (2.5)$$

а густина частинок $\rho(t) = 1 - E_1(t)$.

Аналітичне розуміння можна отримати, розглядаючи рівняння (2.3) з (2.4) у неперервній границі. В роботах [27, 233, 236, 237] було перевірено, що універсальна поведінка на великих часах є однаковою як для дискретного ланцюжка, так і для ланцюжка у неперервній границі. З іншого боку, не універсальна поведінка на малих часах відрізняється. Використовуючи постійну ґратки a , вважатимемо $x = na$ так що $E_n(t) \rightarrow E(t, x)$. У неперервній границі нехай $F = F(a)$ та $q = q(a)$. Тоді розглядаємо границю $a \rightarrow 0$ і одночасно $F \rightarrow \infty$ та $q - 2 \rightarrow 0$ так що границі

$$\mu = \lim \frac{2}{q} F a^2 \quad \text{та} \quad \lambda = \lim \frac{q - 2}{q} F a \quad (2.6)$$

існують. Тут $\lambda = 0$ зводиться до ланцюжка, а протилежна границя $\lambda \rightarrow \infty$ дає поведінку на ґратці Бете. Далі нехай $F(a) = \mu a^{-2}$ та $q(a) = 2 + \frac{2\lambda}{\mu} a$. Тоді в наближенні бен-Аврагама-Ґлассера, із (2.3) та (2.4) матимемо на ґратці Бете диференційне рівняння

$$\frac{\partial}{\partial t} E(t, x) = (\lambda x + \mu) \frac{\partial^2}{\partial x^2} E(t, x), \quad E(t, 0) = 1, \quad E(t, \infty) = 0, \quad (2.7)$$

де граничні умови вже включені. Початкова умова (2.5) стає $E(0, x) = e^{-cx}$, де c – початкова концентрація набору нескорельованих частинок [27]. Шукана густина частинок рівна [2, 20]

$$\varrho(t) = - \left. \frac{\partial}{\partial x} E(t, x) \right|_{x=0}. \quad (2.8)$$

Таким чином, у неперервній границі координаційне число $q - 2 \simeq \frac{2\lambda}{\mu} a \rightarrow 0$ стає нескінченно близьким до $q = 2$. Отже, ми нескінченно близькі до ланцюжка, де наближення (2.4) застосовне. Звідси випливає, що наближення бен-Аврагама-Ґлассера має стати точним у неперервній границі (2.6), хоча залишається наближенням у випадку дискретної ґратки Бете. У неперервній границі, ми вибираємо розмірність часу та простору так, щоб $\mu > 0$ стало безрозмірною константою. Тоді розмірний параметр λ описуватиме перехід між дифузійно-обмеженим випадком (одновимірний ланцюжок), коли $\lambda = 0$, та реакійно-обмеженим випадком (ґратка Бете), коли $\lambda \rightarrow \infty$.

У роботі [26], рівняння (2.7) було вивчено шляхом накладання умови $\mu = 0$ із самого початку [26], що у неперервній границі можливо тільки при фіксованому $q > 2$. Потім розглядався скейлінговий анзац $E(t, x) = \Phi(xt^{-1/z})$. Оскільки x має розмірність довжини, показник z можна інтерпретувати як динамічний критичний показник. Вибраний анзац приводить до $z = 1$ та явної скейлінгової функції $\Phi(u) = \exp\left(-\frac{q}{q-2}u\right)$ [26]. Однак, такий результат здається проблематичним із кількох причин.

1. Особливість для $q \rightarrow 2$ перешкоджає плавному переходу від ґратки Бете до одновимірного ланцюжка. Крім того, скейлінгова функція містить координатне число q явно. Однак Φ має бути універсальною та не залежати від неуніверсальних параметрів, таких як q .
2. Динамічний показник $z = 1$ означатиме балістичне перенесення через ґратку Бете, на відміну від дифузійного руху окремих частинок. Такий результат, якщо він дійсно вірний, був би надзвичайно дивним і суперечив би висновку рівняння руху (2.3) зі стрибками окремих частинок по ґратці.
3. Спостережувані величини, такі як густина, знаходяться шляхом обчислення похідних від $E(t, x)$ при $x = 0$, див. (2.8). Це означає, що у виразі $\lambda x + \mu$, який виникає у (2.7), доданок λx не можна вважати великим по відношенню до μ .

Ми робимо висновок, що просто накладати умову $\mu = 0$ у (2.7) некоректно і необхідно проводити повний аналіз з $\mu > 0$. Дійсно, в розділі 2.3 ми покажемо, що важливо розглядати $\mu > 0$, що приводить до динамічного показника $z = 2$, що узгоджується з дифузійним рухом окремих частинок. Крім того, перехід від одновимірного ланцюжка до ґратки Бете може бути отриманий явно.

Однак простого скейлінгового анзацу для розв'язку рівняння (2.7) знайти не вдалося. Тому корисним проміжним завданням є розгляд стаціонарного стану коагуляційно-дифузійного процесу при наявності стохастичного скидання (ресет). Ця концепція була введена Евансом та Маджумдаром [65, 66] для броунівського руху однієї частинки. Ідея є наступною. Динаміка розглядається інтервалах часу

Δt . На кожному часовому кроці частинка або скидається в початок координат з ймовірністю $r\Delta t$, або робить крок згідно звичайного броунівського руху з ймовірністю $1 - r\Delta t$. Тут параметр $r > 0$ називається швидкістю скидання. Відповідне основне рівняння являє собою модифіковану форму рівняння дифузії і призводить до негаусового стаціонарного стану. [65, 66, 68]. Аналізуючи алгоритми пошуку, можна показати, що стохастичне скидання може прискорити релаксацію статистичної системи до нового нерівноважного стаціонарного стану [65, 66, 68, 107–110]. Такий результат знаходить застосування у теорії РНК-полімерази [245].

Ця концепція може бути поширена і для задачі багатьох тіл, такої як $1D$ коагуляційно-дифузійний процес, що описується методом порожніх інтервалів [29]. Тут ми характеризуємо скидання заданим розподілом $S(x)$ порожніх інтервалів розміру x . Наприклад, можна розглянути $S(x) = E(0, x)$, що буде описувати скидання у початковий стан. $S(x)$ є ймовірністю знайти порожній кластер, тому природно підкоряється умовам $S(0) = 1$ та $S(\infty) = 0$. Густина частинок у такому стані задається як $c = -\partial_x S(x)|_{x=0}$. За аналогією зі скиданням у броунівському русі, описаному вище, на кожному часовому кроці або скидається вся система у стан, що описується $S(x)$, з ймовірністю $r\Delta t$, або виконується стандартний крок під час коагуляційно-дифузійного процесу, з ймовірністю $1 - r\Delta t$. Вибір неперервної границі значно спрощує аналіз. Тут ми узагальнюємо коагуляційно-дифузійний процес в одновимірному випадку [29] на випадок ґратки Бете. Ми зосереджуємося на неперервній границі та на стаціонарному стані з ймовірністю знайти порожній кластер $E(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} E(t, x)$. Узагальнюючи стаціонарну границю (2.7), матимемо

$$(\lambda x + \mu) \frac{\partial^2}{\partial x^2} E(x) - rE(x) + rS(x) = 0 \quad , \quad E(0) = 1 \quad , \quad E(\infty) = 0. \quad (2.9)$$

При цьому швидкістю скидання r грає роль керуючого параметра, що описує відстань від вільного коагуляційно-дифузійного процесу, оскільки час релаксації до стаціонарного стану розбігається як $r \rightarrow 0$ [29, 65, 66, 68]. Всюди ми припускаємо, що r достатньо малий, щоб можна було застосувати неперервну границю. Стаціонарна густина задається як $\varrho = -\partial_x E(x)|_{x=0}$. За допомогою розмірного аналізу

знаходимо, що швидкістю скидання визначає шкалу часу $t_r \sim 1/r$, і відповідний масштаб довжини $\ell_r \sim t_r^z$ так, що на відстанях $\ell \ll \ell_r$ знаходимо кореляції, які виходять із звичайної динаміки без скидання, в той час як для відстаней $\ell \gg \ell_r$ кореляції стану зі скиданням зберігаються [29]. Параметр λ управляє характером динаміки без скидання і ми звернемося до традиційної скейлінгової теорії [64, 246] для інтерпретації результатів. Тут скидання буде служити орієнтиром для інтерпретації нестационарної динаміки.

У наступному підрозділі 2.2, ми даємо розв'язок задачі стаціонарного стану (2.9) зі скиданням.

2.2. Стаціонарна поведінка зі скиданням

Перш ніж представити аналіз точного розв'язку коагуляційно-дифузійної моделі зі стохастичним скиданням, коротко обговоримо середньо-польовий результат. Аналіз розмірностей призводить до наступного. Якщо Λ позначає масштаб довжини відліку, тоді з означень та рівняння (2.9) матимемо наступні скейлінгові розмірності $[\lambda] = \Lambda^{-1}$, $[\mu] = \Lambda^0 = 1$, $[c] = \Lambda^{-1}$ та $[r] = \Lambda^{-2}$. Звідси густина частинок ϱ повинна мати ту ж розмірність, що й концентрація c . Будь-яка інша залежність може входити тільки через функції безрозмірних аргументів, відповідно густина частинок у середньо-польовому підході повинна мати вигляд

$$\varrho_{\text{MF}} = c f_{\text{MF}} \left(\frac{r}{\lambda c}, \frac{\lambda}{c} \right). \quad (2.10)$$

Крім того, при малих швидкостях скидання $r \rightarrow 0$ стаціонарна густина не повинна залежати від густини c стану, в який виконується скидання. Отже, для досить малих r скейлінгова функція f_{MF} повинна стати незалежною від свого другого аргументу. Це фіксує форму середньо-польової скейлінгової функції f_{MF} для невеликого першого аргументу, а отже, $\varrho_{\text{MF}} \sim r/\lambda$.

Тепер повернемося до точного розв'язку коагуляційно-дифузійної моделі зі стохастичним скиданням. Рівнянням руху ϵ (2.9), з відповідними граничними умовами, де $S(x)$ характеризує порожні інтервали конфігурації скидання та задовільняє граничним умовам $S(0) = 1$ та $S(\infty) = 0$ [29].

Слідуючи [29], базис розв'язків відповідного однорідного рівняння запишеться у вигляді $\lambda^{-1}\sqrt{r(\lambda x + \mu)} I_1\left(\frac{2\sqrt{r}}{\lambda}\sqrt{\lambda x + \mu}\right)$ та $\lambda^{-1}\sqrt{r(\lambda x + \mu)} K_1\left(\frac{2\sqrt{r}}{\lambda}\sqrt{\lambda x + \mu}\right)$, де I_1, K_1 – модифіковані функції Бесселя 1-ого роду [247]. Методом варіації довільних сталих, ми знаходимо

$$\begin{aligned} E(x) &= A\xi(x) K_1(2\xi(x)) + B\xi(x) I_1(2\xi(x)) \\ &+ 2\sqrt{r}\xi(x) K_1(2\xi(x)) \int_0^x \frac{\sqrt{r} I_1(2\xi(z))}{\lambda\xi(z)} S(z) dz \\ &+ 2\sqrt{r}\xi(x) I_1(2\xi(x)) \int_x^\infty \frac{\sqrt{r} K_1(2\xi(z))}{\lambda\xi(z)} S(z) dz, \end{aligned} \quad (2.11)$$

де ми використовували скорочені позначення $\xi(x) = \sqrt{r(\lambda x + \mu)} / \lambda$. Беручи до уваги граничні умови, бачимо, що $B = 0$ та

$$A = \frac{1}{u K_1(2u)} - 2\frac{r}{\lambda} \frac{I_1(2u)}{K_1(2u)} \int_0^\infty \frac{K_1(2\xi(z))}{\xi(z)} S(z) dz, \quad (2.12)$$

з $u = \sqrt{r\mu}/\lambda$. Отже, загальний розв'язок (2.9) для довільного $S(x)$ задається як

$$\begin{aligned} E(x) &= \frac{\xi(x) K_1(2\xi(x))}{u K_1(2u)} \\ &- 2\sqrt{r}\xi(x) \frac{I_1(2u)}{K_1(2u)} K_1(2\xi(x)) \int_0^\infty dz \frac{\sqrt{r} K_1(2\xi(z)) S(z)}{\lambda\xi(z)} \\ &+ 2\sqrt{r}\xi(x) I_1\left(\frac{2\xi(x)}{\sqrt{r}}\right) \int_x^\infty dz \frac{\sqrt{r} K_1(2\xi(z)) S(z)}{\lambda\xi(z)} \\ &+ 2\sqrt{r}\xi(x) K_1\left(\frac{2\xi(x)}{\sqrt{r}}\right) \int_0^x dz \frac{\sqrt{r} I_1(2\xi(z)) S(z)}{\lambda\xi(z)}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Стационарна гуситна ϱ тоді

$$\varrho = - \left. \frac{\partial E(x)}{\partial x} \right|_{x=0} = \sqrt{\frac{r}{\mu}} \frac{K_0(2u)}{K_1(2u)} - \frac{r}{\sqrt{\mu}} \frac{1}{K_1(2u)} \int_0^\infty dz \frac{\sqrt{r} K_1(2\xi(z)) S(z)}{\lambda\xi(z)}. \quad (2.14)$$

Використовуючи тотожність [247], ми можемо виразити K_1 наступним чином

$$\frac{\sqrt{r}K_1[2\xi(x)]}{\lambda\xi(x)} = -\frac{1}{\sqrt{r}}\frac{\partial K_0[2\xi(x)]}{\partial x},$$

та інтегруючи рівняння (2.14) частинами, отримаємо більш просту форму

$$\varrho = \sqrt{\frac{r}{\mu}}\frac{1}{K_1(2u)}\int_0^\infty dz K_0(2\xi(z))\left(-\frac{dS(z)}{dz}\right). \quad (2.15)$$

В якості явних прикладів ми розглянемо тут скидання до конфігурації нескорельованих частинок з концентрацією c . Тоді $S(x) = e^{-cx}$. Надалі ми обмежимося цим окремим випадком.

Зокрема, в границі $\lambda \rightarrow 0$ отримаємо результат для одновимірного ланцюжка, відтворюючи вже відомий [29]:

$$\varrho|_{\lambda \rightarrow 0} = \frac{c\sqrt{r/\mu}}{c + \sqrt{r/\mu}} = c\frac{\sqrt{r/(\mu c^2)}}{1 + \sqrt{r/(\mu c^2)}} = c\mathcal{Q}(v). \quad (2.16)$$

де скейлінгова змінна $v = \sqrt{r/(\mu c^2)}$, а скейлінгова функція $\mathcal{Q}(v) = v/(1+v)$. Подібно для довільного $\lambda > 0$ рівняння (2.15) можна перетворити у скейлінгову форму

$$\varrho = c\mathcal{P}\left(\frac{\sqrt{r\mu}}{\lambda}, \frac{c\mu}{\lambda}\right), \quad \mathcal{P}(u, w) = \frac{u}{K_1(2u)}\int_0^\infty dy K_0\left(2u\sqrt{y+1}\right)e^{-wy}, \quad (2.17)$$

зі скейлінговими змінними $u = \sqrt{r\mu}/\lambda$ та $w = c\mu/\lambda$ (так що $v = u/w$). Асимптотично матимемо

$$\mathcal{P}\left(u, \frac{u}{v}\right) \simeq \begin{cases} \frac{v}{v+1} & ; \text{якщо } u \rightarrow \infty, \\ -uv(\ln(uv) + C_E) & ; \text{якщо } u \rightarrow 0, \end{cases} \quad (2.18)$$

де $C_E \simeq 0.5772\dots$ – константа Ойлера. Граничні випадки $u \rightarrow \infty$ (чи $\lambda \rightarrow 0$) відтворюють відомий результат (2.16) для одновимірного ланцюжка. Інша границя $u \rightarrow 0$ (чи $\lambda \rightarrow \infty$), однак, дає неочікувану поведінку моделі на ґратці Бете.

Рівняння (2.18) виводиться в такий спосіб: спочатку для $u \rightarrow \infty$ використовується асимптотика $K_\nu(z) \simeq \sqrt{\pi/2z} e^{-z} (1 + O(1/z))$ так, що

$$\mathcal{P}\left(u, \frac{u}{v}\right) \simeq ue^{2u}\int_0^\infty dy \frac{\exp(-2u\sqrt{y+1} - uy/v)}{(y+1)^{1/4}} \simeq u\int_0^\infty dy e^{-u(1+1/v)y} = \frac{v}{v+1},$$

де ми використовували той факт, що основний внесок в інтеграл вносять значення $y \ll 1$. Далі для $u \rightarrow 0$ ми перепишемо інтеграл наступним чином

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\left(u, \frac{u}{v}\right) &= \frac{ue^{u/v}}{K_1(2u)} \left[\int_0^\infty dz K_0\left(2uz^{1/2}\right) e^{-uz/v} - \int_0^1 dz K_0\left(2uz^{1/2}\right) e^{-uz/v} \right] \\ &\simeq \frac{ue^{u/v}}{K_1(2u)} \left[\frac{v}{2u} e^{uv} \Gamma(0, uv) + \int_0^1 dz \left[\ln\left(uz^{1/2}\right) + C_E \right] e^{-uz/v} \right] \\ &= \frac{ue^{u/v}}{K_1(2u)} \left[\frac{v}{2u} e^{uv} \Gamma(0, uv) + (\ln u + C_E) \frac{(1 - e^{-u/v})}{u/v} + \frac{1}{2} \left(C_E + \ln \frac{u}{v} + \Gamma\left(0, \frac{u}{v}\right) \right) \right] \\ &\simeq uv(-C_E - \ln(uv)) + O(u^2), \end{aligned}$$

де у другому рядку перший інтеграл обчислюється за допомогою результатів роботи [248], де $\Gamma(0, x)$ неповна гамма-функція [247],¹, а в другому доданку головний внесок в функцію Бесселя K_0 для малих аргументів оцінювався із [247]. Останній інтеграл обчислювався в третьому рядку за допомогою [249], з подальшим розкладом в u за головними внесками, використовуючи роботу [247].

Нарешті, повертаючись до вихідних змінних, ми знаходимо з (2.18) наступну скейлінгову поведінку при малих швидкостях скидання $r \ll 1$

$$\varrho \simeq \begin{cases} \sqrt{r}/\mu & ; \text{ якщо } \lambda \rightarrow 0 \quad 1D \text{ ланцюжок,} \\ \frac{r}{\lambda} \left[\ln \frac{\lambda c}{r} - C_E \right] & ; \text{ якщо } \lambda \rightarrow \infty \quad \text{ґратка Бете.} \end{cases} \quad (2.19)$$

Ми отримали загальну форму як у рівнянні (2.10). Однак, ми спостерігаємо на ґратці Бете логарифмічну поправку до скейлінгу, що містить швидкість скидання r . Це можна інтерпретувати як ефект кореляцій, який відрізняє поведінку на ґратці Бете від простого середньо-польового опису.

У цьому підрозділі ми дослідили властивості нерівноважного стаціонарного стану, який виникає через ненульову швидкість скидання. У наступному підрозділі ми розглянемо залежну від часу поведінку коагуляційно-дифузійного процесу на ґратці Бете за відсутності скидання. Ми побачимо, що отримані в цьому випадку рівняння аналогічні розглянутим у цьому підрозділі.

¹ $\Gamma(0, x) = E_1(x) = \text{Ei}(1, x) = -\text{Ei}(-x)$ можна виразити як експоненціальних інтеграл в різних позначеннях, див., наприклад, [247, 249]

2.3. Поведінка залежна від часу

Тепер звернемося до часової поведінки коагуляційно-дифузійного процесу, але без стохастичного скидання. Якби також було б присутнє скидання із фіксованою швидкістю $r > 0$, легко бачити, що в лаплас-просторі змінна, спряжена з часом, рівна $s + r$, яка повинна бути оцінена у границі великих часів $s \rightarrow 0$. Це б дало експоненціально швидку і неуніверсальну релаксацію до стаціонарного стану зі скиданням, розглянуту вище, і не дало б ніякої інформації про універсальну поведінку на великих часах коагуляційно-дифузійного процесу з $r = 0$. Залежне від часу рівняння (2.7) розв'язується перетворенням Лапласа. Записуючи $\bar{f}(s) = \mathcal{L}(f(t))(s) = \int_0^\infty dt e^{-st} f(t)$, отримаємо перетворене рівняння руху

$$s\bar{E}(s, x) - E(0, x) = (\lambda x + \mu)\partial_x^2 \bar{E}(s, x), \quad (2.20)$$

що практично ідентично стаціонарному рівнянню руху (2.9) зі скиданням. Таким чином, розв'язок рівняння будемо проводити подібним чином. Виходячи з розв'язку однорідного рівняння, а саме $\sqrt{\lambda x + \mu} K_1\left(\frac{2\sqrt{s}}{\lambda}\sqrt{\lambda x + \mu}\right)$ та $\sqrt{\lambda x + \mu} I_1\left(\frac{2\sqrt{s}}{\lambda}\sqrt{\lambda x + \mu}\right)$, загальний розв'язок диференційного рівняння запишеться у наступному вигляді

$$\begin{aligned} \bar{E}(s, x) = & A \frac{\lambda \xi(x)}{\sqrt{s}} K_1(2\xi(x)) + B \frac{\lambda \xi(x)}{\sqrt{s}} I_1(2\xi(x)) \\ & + \frac{2\xi(x)}{\sqrt{s}} K_1(2\xi(x)) \int_0^x \frac{\sqrt{s} I_1(2\xi(z))}{\lambda \xi(z)} E_0(z) dz \\ & + \frac{2\xi(x)}{\sqrt{s}} I_1(2\xi(x)) \int_x^\infty \frac{\sqrt{s} K_1(2\xi(z))}{\lambda \xi(z)} E_0(z) dz, \end{aligned} \quad (2.21)$$

де $\xi(x) = \sqrt{s(\lambda x + \mu)}/\lambda$ та $E_0(x) = E(0, x)$ – початкова умова. Єдина різниця у порівнянні зі скиданням з розділу 2.2 полягає у граничних умовах, які тепер мають вигляд

$$\bar{E}(s, 0) = 1/s \quad \text{and} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \bar{E}(s, x) = 0. \quad (2.22)$$

Таким чином, $B = 0$ та

$$A = \frac{1}{s\sqrt{\mu} K_1\left(\frac{2\sqrt{s\mu}}{\lambda}\right)} - \frac{2I_1\left(\frac{2\sqrt{s\mu}}{\lambda}\right)}{\lambda K_1\left(\frac{2\sqrt{s\mu}}{\lambda}\right)} \int_0^\infty \frac{\sqrt{s} K_1(2\xi(z))}{\lambda \xi(z)} E_0(z) dz. \quad (2.23)$$

Використовуючи скейлінгові змінні $u = \sqrt{s\mu}/\lambda$ та $v = x\lambda/\mu$ так, що $\xi(x) = u\sqrt{1+v}$, ми отримуємо ймовірність знайти порожній інтервал в наступній формі

$$\begin{aligned} \bar{E}(u, v) = & \frac{\sqrt{1+v}}{s} \left[\frac{K_1(2u\sqrt{1+v})}{K_1(2u)} \right. \\ & - 2u^2 K_1(2u\sqrt{1+v}) \frac{I_1(2u)}{K_1(2u)} \int_0^\infty \frac{K_1(2u\sqrt{1+z})}{\sqrt{1+z}} E_0\left(\frac{z\mu}{\lambda}\right) dz \\ & + 2u^2 K_1(2u\sqrt{1+v}) \int_0^{\lambda x/\mu} \frac{I_1(2u\sqrt{1+z})}{\sqrt{1+z}} E_0\left(\frac{z\mu}{\lambda}\right) dz \\ & \left. + 2u^2 I_1(2u\sqrt{1+v}) \int_{\lambda x/\mu}^\infty \frac{K_1(2u\sqrt{1+z})}{\sqrt{1+z}} E_0\left(\frac{z\mu}{\lambda}\right) dz \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Скейлінг описується змінною $uv = \sqrt{\mu s} x$. Ця скейлінгова змінна не залежить від параметру λ , який описує перехід між одновимірним ланцюжком та ґраткою Бете. Оскільки $\mu > 0$ є фіксованою безрозмірною константою, тоді динамічний показник $z = 2$. Це означає, що як на одновимірному ланцюжку, так і на ґратці Бете перенесення є дифузійним.

2.3.1. Густина

Густина частинок після перетворення Лапласа рівна $\bar{\varrho}(s) = -\partial_x \bar{E}(s, x)|_{x=0}$. Це передбачає скейлінгову форму $\bar{\varrho}(s) = s^{-1} f_{\bar{\varrho}}(u)$, де скейлінгова змінна $u = \sqrt{s\mu}/\lambda$. Явно

$$\bar{\varrho}(s) = \frac{1}{s} \frac{u}{K_1(2u)} \int_0^\infty dy K_0\left(2u\sqrt{y+1}\right) \mathcal{P}_0\left(\frac{y\mu}{\lambda}\right) \quad (2.25)$$

з $\mathcal{P}_0(x) = -\partial_x E_0(x)$ – початкова ймовірність порожнього інтервалу розміру x , з зайнятим найближчим сусідом [27]. Виберемо в якості початкової умови набір нескорельованих частинок з концентрацією c , а отже $\mathcal{P}_0(x) = ce^{-cx}$.

З цього останнього виразу можна витягти граничну поведінку скейлінгової функції $f_{\bar{\rho}}(u)$ для двох випадків, що представляють інтерес:

(а) $u \gg 1$, що означає, що топологія наближається до ланцюжка ($\lambda \rightarrow 0$);

(б) $u \ll 1$, що означає, що ми повинні бути в наближенні середнього поля ($\lambda \rightarrow \infty$).

Спочатку, для $u \gg 1$, асимптотична поведінка функції Бесселя $K_\nu(z) \sim e^z/\sqrt{z}$ дає

$$\bar{\rho}(s) \simeq \frac{c u e^{2u}}{s} \int_0^\infty dy \frac{e^{-2u\sqrt{y+1}-ay}}{(y+1)^{1/4}}, \quad \text{з } \mathbf{a} = c\mu/\lambda. \quad (2.26)$$

В межах цієї границі, тільки область $y \ll 1$ вносить вклад в інтеграл і ми можемо переписати його як

$$\bar{\rho}(s) \simeq \frac{cu}{s} \int_0^\infty dy \frac{e^{-uy-ay}}{y/4+1} = \frac{cu}{s(\mathbf{a}+u)} = \frac{\sqrt{s}}{c\sqrt{\mu} + \sqrt{s}}. \quad (2.27)$$

Роблячи обернене перетворення Лапласа, ми відтворюємо добре відомий результат для густини частинок на одновимірному ланцюжку, наприклад [27]

$$\rho(t) = c e^{\mu c^2 t} \operatorname{erfc}(c\sqrt{\mu t}) \quad (2.28)$$

з очікуваною асимптотичною поведінкою $\rho(t) \xrightarrow{t \gg 1} (\pi\mu t)^{-1/2}$. Далі, для $u \ll 1$, ми починаємо знов з (2.25), відокремлюючи область інтегрування та використовуючи скорочення (2.26). Потім ми перекидаємо область інтегрування, а в другому доданку ми також розкладаємо функцію Бесселя для невеликих аргументів. Залишаючи головні внески у u , це дає

$$\begin{aligned} \bar{\rho}(s) &= \frac{1}{s} \frac{cu}{K_1(2u)} \left[\int_{-1}^\infty dy K_0(2u\sqrt{y+1}) e^{-ay} - \int_{-1}^0 dy K_0(2u\sqrt{y+1}) e^{-ay} \right] \\ &\simeq \frac{c u e^a}{s K_1(2u)} \left[\int_0^\infty dy K_0(2u\sqrt{y}) e^{-ay} + \int_0^1 dy (\ln(u\sqrt{y}) + C_E) e^{-ay} \right]. \quad (2.29) \end{aligned}$$

Перший інтеграл є відомим [248], а другий можна переписати, використовуючи результати робіт [249], [247]. Як наслідок

$$\bar{\varrho}(s) \simeq \frac{cu^2e^a}{sa} \left[e^{u^2/a} \Gamma(0, u^2/a) + 2 \ln(u) (1 - e^{-a}) + (C_E (1 - 2e^{-a}) - \ln(a) - \Gamma(0, a)) \right] \quad (2.30)$$

з неповною гамма-функцією $\Gamma(0, x)$ [247] та $C_E = 0.5772\dots$ – константа Ойлера. Коли $a \rightarrow 0$, робимо висновок, що тільки перший доданок в (2.29) дає головний внесок. Тому густину частинок слід перетворити через вихідні змінні як

$$\bar{\varrho}(s) \simeq \frac{e^{c\mu/\lambda}}{\lambda} e^{s/(\lambda c)} \Gamma\left(0, \frac{s}{\lambda c}\right). \quad (2.31a)$$

Обчислюючи обернене перетворення Лапласа для (2.31a), можна відновити залежну від часу густину частинок

$$\varrho(t) = \frac{ce^{c\mu/\lambda}}{1 + t\lambda c} \sim t^{-1}, \quad (2.31b)$$

яка повинна відтворювати асимптотичну середньо-польову поведінку [26, 220–222]. Дійсно, середньо-польовий скейлінг, який обговорювався для скидання у попередньому розділі 2.2, можна використовувати майже без змін, де тепер s грає роль, що раніше виконувала швидкістю скидання r . Єдина зміна пов'язана з початковою умовою (2.22), так що тепер $\bar{\varrho}_{\text{MF}}(s) = \frac{c}{s} f_{\text{MF}}\left(\frac{s}{\lambda c}\right) \sim \lambda^{-1}$ для малих s , що може бути еквівалентно $\varrho_{\text{MF}}(t) \sim t^{-1}$.

Однак, виведення рівнянь (2.31) не враховує належним чином наявність логарифмічних доданків для малих значень s в $\bar{\varrho}(s)$ в границі великих значень λ . Дійсно, підставляючи вихідні змінні у (2.30) і потім розкладаючи для $\lambda \rightarrow \infty$, ми маємо

$$\begin{aligned} \bar{\varrho}(s) &= \frac{e^{c\mu/\lambda}}{2\lambda} \left[e^{s/(\lambda c)} \Gamma\left(0, \frac{s}{\lambda c}\right) \right. \\ &\quad \left. + \ln\left(\frac{\mu s}{\lambda^2}\right) (1 - e^{-c\mu/\lambda}) + \left(C_E(1 - 2e^{-c\mu/\lambda}) - \ln\frac{c\mu}{\lambda} - \Gamma\left(0, \frac{c\mu}{\lambda}\right)\right) \right] \\ &\simeq -\frac{\ln s}{\lambda} + \frac{1}{\lambda} (\ln(\lambda c) - 2C_E) + O(\lambda^{-2}). \end{aligned} \quad (2.32)$$

Цей логарифмічний доданок $\sim \ln s$ є аналогічним (2.19), що й для скидання.

2.3.2. Інтегральна густина

Обернене перетворення Лапласа для асимптотичної форми (2.32) не існує. Тому далі нам знадобиться наступний математичний результат [250].

Означення. Функція $L(t)$ як кажуть, повільно змінюється на нескінченності, якщо $L(tx)/L(t) \rightarrow 1$ для $t \rightarrow \infty$ та для довільного фіксованого додатнього x .

$L(t) = \ln t$ – приклад функції, що повільно змінюється на нескінченності.

Теорема. (Гарді-Літлвуда-Карамата-Феллера) Якщо $F(t) = \int_0^t dt' f(t')$, $L(t)$ – функція, що повільно змінюється на нескінченності та $0 \leq \kappa < \infty$, то наступні твердження еквівалентні

$$\bar{f}(s) \stackrel{s \rightarrow 0}{\sim} s^{-\kappa} L\left(\frac{1}{s}\right) \quad \text{та} \quad F(t) \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\Gamma(\kappa + 1)} t^\kappa L(t). \quad (2.33)$$

Зауваження. Якщо $\kappa > 0$ і якщо існує скінченне t_0 , так що $f(t) = \frac{dF(t)}{dt}$ існує і, крім того, монотонне для $t_0 < t < \infty$, тоді асимптотично $f(t) \sim \kappa F(t)/t$, як $t \rightarrow \infty$ [250]. Це безпосередньо пов'язує асимптотику $\bar{f}(s)$ для $s \rightarrow 0$ з $f(t)$ для $t \rightarrow \infty$, але не може поширюватися на $\kappa = 0$.

Отже, потрібно дослідити інтегральну густину² $P(t) = \int_0^t dt' \varrho(t')$, замість $\varrho(t)$. У лаплас-просторі $\bar{P}(s) = s^{-1} \bar{\varrho}(s)$. Таким чином із вищевикладеного ми маємо

$$\begin{aligned} \bar{P}(s) &= \frac{c\sqrt{s\mu}/\lambda}{s^2} \frac{1}{K_1(2\sqrt{s\mu}/\lambda)} \int_0^\infty dz K_0\left(\frac{2}{\lambda}\sqrt{s(\lambda z + \mu)}\right) e^{-cz} \\ &= \frac{ce^{c\mu/\lambda}\sqrt{s\mu}/\lambda}{s^2 K_1(2\sqrt{s\mu}/\lambda)} \left[\frac{\lambda}{2c\mu} e^{s/(\lambda c)} \Gamma\left(0, \frac{s}{\lambda c}\right) \right. \\ &\quad \left. - \int_0^1 dy K_0\left(\frac{2}{\lambda}\sqrt{\mu sy}\right) e^{-c\mu y/\lambda} \right]. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Хоча для $\lambda \rightarrow 0$ нове обговорення не потрібно, ми розглядаємо асимптотичний випадок $\lambda \rightarrow \infty$, де з (2.32) маємо

$$\bar{P}(s) \simeq -\frac{1}{\lambda} \frac{\ln s}{s} + \frac{\ln(\lambda c) - 2C_E}{\lambda} \frac{1}{s} + O(\lambda^{-2}) \quad (2.35)$$

²Позначається великою грецькою буквою P (rho).

та використовуючи [251] ми маємо для великих часів

$$P(t) \simeq \frac{1}{\lambda} (C_E + \ln t) + \frac{\ln(\lambda c) - 2C_E}{\lambda} + O(\lambda^{-2}) = \frac{\ln \lambda ct}{\lambda} - \frac{C_E}{\lambda} + O(\lambda^{-2}). \quad (2.36)$$

Ця логарифмічна поведінка відтворює очікувану середньо-польову поведінку для густини

$$\varrho(t) = \frac{\partial P(t)}{\partial t} \sim \frac{1}{\lambda t} \quad (2.37)$$

без логарифмічного доданку в залежній від часу густині.

2.4. Скейлінг переходу у коагуляційно-дифузійному процесі між одновимірним ланцюжком та ґраткою Бете

Щоб описати перехід у коагуляційно-дифузійному процесі на ґратці Бете і одновимірному ланцюжку, ми звертаємося до відповідної теорії скейлінгу. [64, 246]. У стаціонарному стані перехід описується зміною параметру λ від одновимірного ланцюжка ($\lambda = 0$) до ґратки Бете ($\lambda \rightarrow \infty$). Стаціонарну густину можна записати у такій скейлінговій формі

$$\varrho(r, c, \lambda) = b^{-\beta} \mathcal{R} \left(br, b^{1/\varphi'} c (br)^{-\varphi}, b^{1/\varphi} \lambda \right) = \lambda^{\beta\varphi} \mathcal{R} \left(r \lambda^{-\varphi}, cr^{-\varphi} \lambda^{1-\varphi/\varphi'}, 1 \right), \quad (2.38)$$

де $b > 0$ – коефіцієнт перемасштабування, $\varphi > 0$ та $\varphi' > 0$ – перехідні (кросоверні) показники, а \mathcal{R} – скейлінгова функція. Ми розглядаємо $\mu > 0$ фіксованою безрозмірною константою.

З обговорення скейлінгу стаціонарного стану в підрозділі 2.2, ми маємо, що λ та c повинні мати туж скейлінгову розмірність, а це означає, що $\varphi = \varphi'$. Далі ми визначаємо безрозмірну концентрацію σ скидання через

$$c = \sigma r^\varphi \quad (2.39)$$

та матимемо наступну скейлінгову форму

$$\varrho(r, c, \lambda) = \lambda^{\beta\varphi} \mathcal{R} \left(r \lambda^{-\varphi}, \sigma, 1 \right). \quad (2.40)$$

Перехід між двома скейлінговими режимами, для всіх значень константи σ , описується

$$\mathcal{R}(x, \sigma, 1) \sim \begin{cases} x^\beta & ; \text{ для } x \rightarrow \infty \text{ як } \lambda \rightarrow 0 \text{ ланцюжок} \\ x^{\beta_{\text{MF}}} & ; \text{ для } x \rightarrow 0 \text{ як } \lambda \rightarrow \infty \text{ ґратка Бете} \end{cases} \quad (2.41)$$

і простежується за значеннями ефективного показника $\beta_{\text{eff}}(x) = \partial \ln \mathcal{R}(x, \sigma, 1) / \partial \ln x$. Зміна поведінки повинна відбуватись навколо $x \approx 1$. Тоді з (2.17), перехідна скейлінгова функція може читатись як

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}(r, \sigma, \lambda) = \frac{\sigma r}{K_1(2r^{1/2}\lambda^{-1})} \int_0^\infty dz e^{-\sigma r^{1/2}z} K_0\left(\frac{2}{\lambda}\sqrt{r(\lambda+1)}\right), \quad (2.42)$$

яка дійсно є інваріантною щодо перемасштабування $r' = br$, $\sigma' = \sigma$, $\mu' = \mu$ та $\lambda' = b^{1/2}\lambda$. Отже $\phi = \frac{1}{2}$. Вибираючи $b = \lambda^{-2}$, ми можемо встановити $\mathcal{R}(X, \sigma, 1)$ з $X = r\lambda^{-2}$, так що перехідна скейлінгова функція запишеться як

$$\mathcal{R}(X, \sigma, 1) = \frac{\sigma X}{K_1(2X^{1/2})} \int_0^\infty dz e^{-\sigma X^{1/2}z} K_0\left(2\sqrt{X(z+1)}\right). \quad (2.43)$$

На рисунку 2.4 показано залежність цієї скейлінгової функції від скейлінгової змінної X для декількох значень початкової концентрації σ . Зображена зміна поведінки від $\beta_{\text{MF}} = 1$ на ґратці Бете (для $X \ll 1$) до значення $\beta = \frac{1}{2}$ на одно-мірному ланцюжку (з $X \gg 1$). Ми також виявили, що перехід чіткіше визначається для більших початкових густин. Це здається природним, оскільки при малій густині ґратка заселена рідко і кореляційні ефекти стають менш вираженими.

Границю $\sigma \rightarrow \infty$ можна визначити явно: замінюючи змінну $z \mapsto z\sigma$ у рівнянні (2.43), матимемо

$$\mathcal{R}(X, \sigma, 1) = \frac{X}{K_1(2X^{1/2})} \int_0^\infty dz e^{-X^{1/2}z} K_0\left(2\sqrt{X(z/\sigma+1)}\right). \quad (2.44)$$

Беручи границю $\sigma \rightarrow \infty$, з фіксованим X , доданком z/σ в аргументі K_0 можна знехтувати, звідси

$$\mathcal{R}_\infty(X) = \lim_{\sigma \rightarrow \infty} \mathcal{R}(X, \sigma, 1) = \frac{X^{1/2}K_0(2X^{1/2})}{K_1(2X^{1/2})}. \quad (2.45)$$

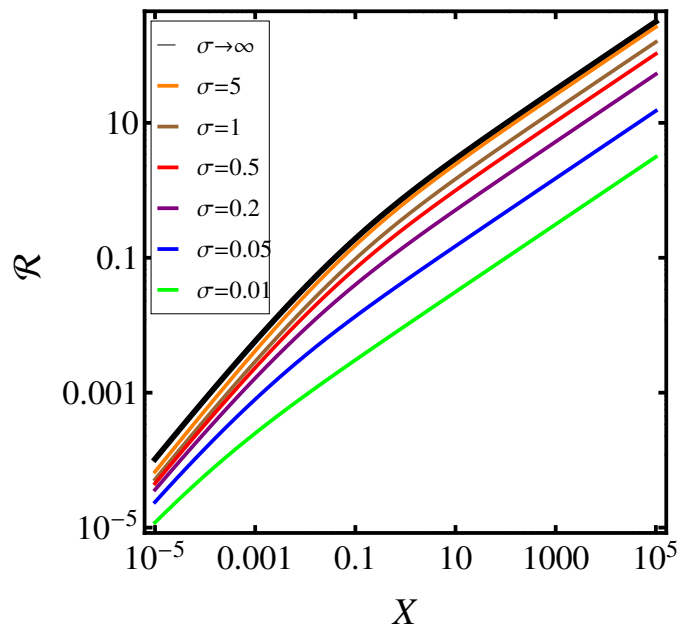


Рис. 2.4. Залежність перехідної (кросверної) скейлінгової функції $\mathcal{R} = \mathcal{R}(X, \sigma, 1)$ від скейлінгової змінної $X = r\lambda^{-2}$ в стаціонарному стані коагуляційно-дифузійного процесу зі стохастичним скиданням для декількох значень початкової безрозмірної концентрації σ . Товста чорна лінія отримана з рівняння (2.45).

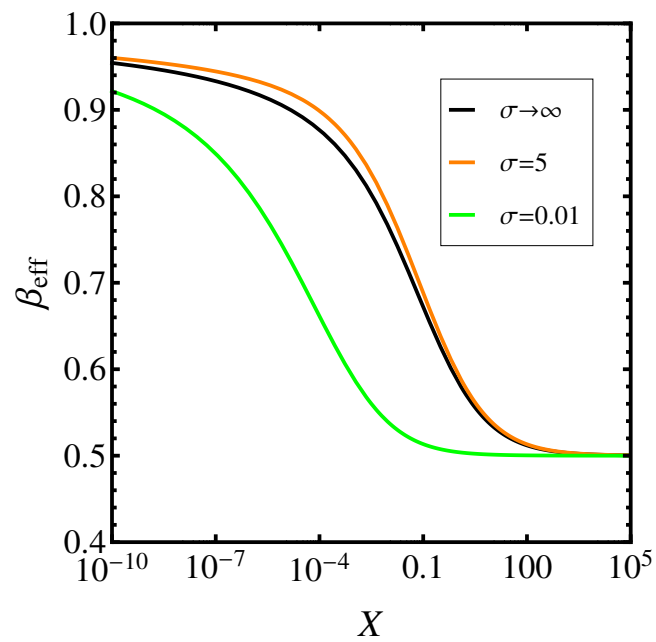


Рис. 2.5. Залежність ефективного показника β_{eff} від скейлінгової змінної $X = r\lambda^{-2}$ в стаціонарному стані коагуляційно-дифузійного процесу зі стохастичним скиданням для трьох початкових концентрацій σ . Помітно, що при зміні λ від 0 до ∞ показник змінюється від $\frac{1}{2}$ (значення для одновимірних систем) до 1 (значення 1 для багатовимірних систем не досягається через логарифмічні поправки).

Це приводить до асимптотики

$$\mathcal{R}_\infty(X) \simeq \begin{cases} X^{1/2} & ; \text{ якщо } X \rightarrow \infty, \\ X [\ln X^{-1} - 2C_E] & ; \text{ якщо } X \rightarrow 0. \end{cases} \quad (2.46)$$

Рисунок 2.5 показує поведінку ефективного показника β_{eff} як функція скейлінгової змінної X для трьох початкових концентрацій σ . У той час як для великих значень X показник β_{eff} є близьким до $\frac{1}{2}$, як і очікувалось, при цьому його значення наближається до одиниці при $X \rightarrow 0$. На відміну від переходу, який описується чистими степеневими законами [64, 246], в даному випадку цей підхід логарифмічно повільний, див. (2.46). До того ж перехід стає більш різким зі збільшенням σ .

Аналогічний розгляд можна провести для залежної від часу густини частинок. Порівнюючи рівняння руху (2.9) та (2.20), ми бачимо, що r та s грають аналогічні ролі. З (2.34) ми матимемо скейлінгову форму інтегрованої за часом густини $\bar{P}(s)s^2 = w\mathcal{P}(u, w)$ зі скейлінговою функцією (2.17) та модифікованим означенням $u = \sqrt{s\mu}/\lambda$ першої скейлінгової змінної, у той час як $w = c\mu/\lambda$ залишатиметься фіксованим. Звідси випливає, що показник β стохастичного скидання (а саме $\rho \sim r^\beta$) та показник α загасання густини (а саме $\rho(t) \sim t^{-\alpha}$) пов'язані через

$$\beta = \alpha. \quad (2.47)$$

Зокрема, якщо ми перейменуємо $\beta_{\text{eff}} \mapsto \alpha_{\text{eff}}$ на рисунку 2.5, ми також матимемо перехід ефективного показника загасання α_{eff} між ланцюжком для $X \gg 1$ та ґраткою Бете для $X \ll 1$.

2.5. Висновки до розділу

Ми дослідили перехід (кросовер) коагуляційно-дифузійного процесу між одновимірним ланцюжком та ґраткою Бете як аналітичний приклад переходу між дифузійно-обмеженим (характерно для одновимірних систем) та реакційно-обмеженим (характерно для багатовимірних систем) кінетичними режимами. Використовуючи наближення бен-Аврагама-Ґлассера, метод порожніх інтервалів може бути розширений від одновимірного ланцюжка (де він є точним) до ґратки

Бете. Кількість гілок q ґратки Бете розглядається як неперервна змінна. Беручи неперервну границю $a \rightarrow 0$, одночасно також беремо границю $q \rightarrow 2$, див. (2.6), так що наближення бен-Аврагама-Ґлассера стає точним в цій неперервній границі. Поведінка моделі тоді описується в термінах двох масштабних констант λ, μ , де $\mu > 0$ є фіксованою константою, у той час як зміна λ від нуля до нескінченності описуватиме перехід від одновимірного ланцюжка до ґратки Бете.

Виявилося, що простий скейлінговий аналіз рівнянь руху моделі не працює. Ми побачили, що це відбувається через несподіваний логарифмічний внесок в універсальну поведінку на великих часах, який також впливає на скейлінг переходу між ланцюжком і ґраткою Бете, див. рисунок 2.5. Така логарифмічна поведінка є неочікуваною у підході середнього поля, результати якого мали б бути справедливими у цьому випадку, виходячи з того факту, що ґратка Бете є нескінченновимірною.

Для розуміння цього переходу, аналіз нерівноважного стаціонарного стану, що досягається коагуляційно-дифузійним процесом при стохастичному скиданні (ресеті), виявився цінним інструментом, що також представляє інтерес сам по собі. Ми побачили, що на ґратці Бете поведінка, близька до критичної, отримана для малих швидкостей скидання $r \rightarrow 0$, відображає логарифмічні поправки до скейлінгу, що характерно для системи при верхній критичній вимірності. Використовуючи математичну дуальність між швидкістю скидання r для стаціонарного стану зі скиданням та лаплас-змінною s спряженою до часу t для нестаціонарної моделі залежної від часу без стохастичного скидання, ми зрозуміли, що необхідно спочатку вивчити інтегровану за часом густину частинок $P(t)$, яка дійсно має логарифмічне загасання на великих часах. На відміну від очікувань середньопольової теорії, поведінка моделі на ґратці Бете несподівано характеризується додатковими логарифмічними поправками. Для системи з великою просторовою вимірністю немає великого відхилення від простої середньопольової поведінки. Це передбачає, що коагуляційно-дифузійний процес на ґратці Бете повинен вести себе радше як для систем при верхній критичній вимірності, а не як у системі з нескінченною просторовою вимірністю. Ця особливість не проявлялась у попе-

редніх дослідженнях рівноважної критичної поведінки статистичних систем на ґратці Бете.

Єдина величина, яка, здається, не вкладається в цю картину – це залежна від часу густина $\varrho(t) = \partial_t P(t)$. Однак в цьому випадку взяття похідної перетворює поведінку спостережуваної $P(t)$, що змінюється повільно, у швидке загасання $\varrho(t)$. Математично добре встановлено, що поведінка похідної $\partial_t P(t)$ може бути значно більш нерегулярною, ніж сама функція $P(t)$ [250].

Наш точний аналіз також призводить до динамічного показником $z = 2$, що узгоджується з мікроскопічним дифузійним рухом окремих частинок. Цей результат суперечить більш раннім твердженням про те, що $z = 1$, який би припускав балістичний рух частинок. Такий результат ґрунтується на невиправданому спрощенні постановки $\mu = 0$ у рівнянні руху (2.7).

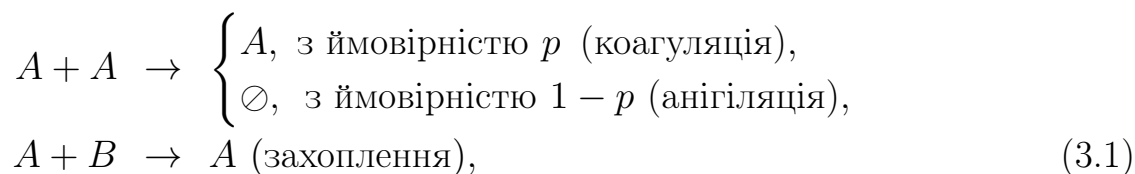
РОЗДІЛ 3

ЗАДАЧА ПРО ВИЖИВАННЯ ЧАСТИНОК У ДВОСОРТНІЙ РЕАКЦІЙНО-ДИФУЗІЙНІЙ СИСТЕМІ

У цьому розділі розглянуто двокомпонентну реакційно-дифузійну систему з реакціями типу $A + A \rightarrow (\emptyset, A)$ та $A + B \rightarrow A$, де переміщення частинок відбувається згідно польотів Леві, які моделюють аномальну дифузію. Застосовуючи ренормгруповий формалізм, розраховано показники загасання густини частинок B та їхньої парної кореляційної функції густина-густина нижче критичної вимірності. Проведено чисельні симуляції даної задачі на одновимірному ланцюжку, результати яких підтверджують аналітичні передбачення. Основні результати опубліковані в [36].

3.1. Керуючі рівняння

На відміну від попереднього розділу у цьому розділі ми досліджуємо систему, у якій присутні два сорти частинок. Ми розглядаємо задачу про виживання частинок-мішеней B у середовищі з рухомими пастками A . Частинок-мішеней B абсорбуються частинками-пастками A , що можуть коагулювати або взаємно анігілюють з відповідними ймовірностями. Усі реакції в системі записуються як:



Аномальна дифузія частинок обидвох сортів забезпечується далекосяжними стрибками – польотами Леві, тобто на кожному часовому кроці довжина стрибка

частинок вибирається з розподілу Леві:

$$\hat{p}_L(r) \sim r^{-d-\sigma}, \quad (3.2)$$

з контролюючим параметром $0 < \sigma \leq 2$ та просторовою вимірністю d .

Для того, щоб дослідити поведінку двокомпонентної реакційно-дифузійної системи (3.1) ми використовуємо добре апробовані методи РГ, які застосовуються до задачі в рамках теорії поля [1, 4, 140]. Застосовуючи стандартну техніку [4, 42, 151], це представлення можна отримати, відображаючи керуючі рівняння на ефективну теорію. Керуючі рівняння досліджуваної моделі будуть представлені далі.

Нехай пастки (частинки A) та мішені (частинки B) можуть займати вузли d -вимірної гіперкубічної ґратки. Частинок обох сортів можуть стрибати з одного вузла на інший згідно розподілу Леві (3.2). Із ймовірністю реакції λ дві частинки A на одному й тому ж вузлі можуть взаємно анігілювати або коагулювати, зменшуючи кількість частинок A , більш того, частинки A з ймовірністю реакції λ' можуть абсорбувати частинки B , які перебувають з ними на одному й тому ж вузлі (3.1).

Ми описуємо таку двосортну реакційно-дифузійну модель в термінах керуючих рівнянь для часового розподілу ймовірностей $P(\{n^A\}; \{n^B\})$ для конфігурації, що характеризується наборами чисел заповнення $\{n^A\} = \dots, n_i^A \dots$ для частинок-пасток A та $\{n^B\} = \dots, n_i^B \dots$ для частинок-мішеней B , $i = 1, \dots, N$, де $\sum_i n_i^A = N_A(t)$ та $\sum_i n_i^B = N_B(t)$. Зміна часового розподілу ймовірностей може бути розкладена на внески від польотів Леві, реакцій коагуляції, анігіляції та захоплення:

$$\begin{aligned} \frac{dP(\{n^A\}; \{n^B\})}{dt} = & \frac{\partial P(\{n^A\}; \{n^B\})}{\partial t} \Big|_L + \frac{\partial P(\{n^A\}; \{n^B\})}{\partial t} \Big|_A + \frac{\partial P(\{n^A\}; \{n^B\})}{\partial t} \Big|_C \\ & + \frac{\partial P(\{n^A\}; \{n^B\})}{\partial t} \Big|_T. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Перший доданок у правій частині рівняння (3.3) – це зміна розподілу ймовірностей $P(\{n^A\}, \{n^B\})$ під час стрибків частинок між вузлами, а другий та третій члени

представляють зміну розподілу ймовірностей $P(\{n^A\}, \{n^B\})$ під час реакцій анігіляції та коагуляції, а останній – зміна розподілу ймовірностей $P(\{n^A\}, \{n^B\})$ при реакції захоплення. Керуюче рівняння для стрибків частинок між вузлами j та i можна записати в такій формі

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial P(\{n^A\}; \{n^B\})}{\partial t} \right|_L &= \sum_{i \neq j} \hat{p}_L(r_{ij}) D_{0A} \left[(n_j^A + 1) P(\dots, n_i^A - 1, \dots, n_j^A + 1, \dots; \{n^B\}) \right. \\ &\quad \left. - n_j^A P(\{n^A\}; \{n^B\}) \right] \\ &+ \sum_{i \neq j} \hat{p}_L(r_{ij}) D_{0B} \left[(n_j^B + 1) P(\{n^A\}; \dots, n_i^B - 1, \dots, n_j^B + 1, \dots) \right. \\ &\quad \left. - n_j^B P(\{n^A\}; \{n^B\}) \right], \end{aligned} \quad (3.4)$$

з $\hat{p}_L(r)$, що задається рівнянням (3.2), D_{0A} та D_{0B} є транспортними (дифузійними) константами для пасток та частинок-мішеней, у той час як підсумовування здійснюється по всіх парах i та j . Реакції анігіляції та коагуляції описуються наступними керуючими рівняннями

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial P(\{n^A\}; \{n^B\})}{\partial t} \right|_A &= \frac{\lambda_A}{l_0^d} \sum_i \left[(n_i^A + 2)(n_i^A + 1) P(\dots, n_i^A + 2, \dots; \{n^B\}) \right. \\ &\quad \left. - n_i^A (n_i^A - 1) P(\{n^A\}; \{n^B\}) \right], \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial P(\{n^A\}; \{n^B\})}{\partial t} \right|_C &= \frac{\lambda_C}{l_0^d} \sum_i \left[(n_i^A + 1) n_i^A P(\dots, n_i^A + 1, \dots; \{n^B\}) \right. \\ &\quad \left. - n_i^A (n_i^A - 1) P(\{n^A\}; \{n^B\}) \right], \end{aligned} \quad (3.6)$$

де константи реакції анігіляції – $\lambda_A = (1 - p)\lambda$, а реакції коагуляції – $\lambda_C = p\lambda$. Останній доданок, що стосується реакції захоплення, у рівнянні (3.3), підкоряється такому керуючому рівнянню:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial P(\{n^A\}; \{n^B\})}{\partial t} \right|_T &= \frac{\lambda'}{l_0^d} \sum_i \left[n_i^A (n_i^B + 1) P(\dots, n_i^A, \dots; \dots, n_i^B + 1, \dots) \right. \\ &\quad \left. - n_i^A n_i^B P(\{n^A\}; \{n^B\}) \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

Керуюче рівняння (3.3) разом з (3.4) – (3.7) описує мікроскопічну поведінку досліджуваної системи та може бути відображене в теоретико-польовій моделі

за допомогою стандартної техніки [4, 42, 151]. Ми представляємо цю теорію в наступному підрозділі.

3.2. Теорія поля

Відображення кінетичного рівняння в задачу теорії поля виконується в рамках стандартної техніки, представляючи його у термінах вторинно-квантованих бозонних операторів у просторі Фока, а потім будуючи інтегральне представлення Дої-Пеліті для когерентних станів результуючої неермітової задачі [42, 151] (див. також [1, 4]). Тоді як перетворення доданку (3.4) для випадку звичайної дифузії ($|r_{ij}| = 1$) приводить до ефективної дії з операторами $D_{oA}\nabla^2$ та $D_{oB}\nabla^2$, де константи дифузії D_{oA} та D_{oB} пов'язані з D_{0A} та D_{0B} , дія для нашої моделі з польотами Леві матиме замість них

$$D_{oA}\nabla^2 \rightarrow D_{oA}\nabla^2 + D_A\nabla^\sigma, \quad D_{oB}\nabla^2 \rightarrow D_{oB}\nabla^2 + D_B\nabla^\sigma, \quad (3.8)$$

(для деталей див. напр. [164]). ∇^σ є символічним записом оператора, означеного його дією в імпульсному просторі [162]:

$$\nabla^\sigma e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = -|k|^\sigma e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (3.9)$$

Як ми вже зазначали [162, 252, 253], доданки зі звичайною дифузиею $\sim \nabla^2$ є нерелевантними для випадку $\sigma < 2$ і тому можуть бути виключені з теоретико-польового опису. Однак зауважимо, що для того, щоб описати поведінку поблизу $\sigma \rightarrow 2$, обидва члени (для нормальної дифузії та аномальної) мають бути враховані у теоретико-польовому описі.

В результаті процедури Дої-Пеліті ми використовуємо ефективну теорію поля, що описує поведінку двосортної реакційно-дифузійної моделі (3.1) з польотами Леві з результуючою дією [252, 253]:

$$S = \int d^d x dt \left\{ \bar{a} (\partial_t - \nabla^\sigma) a + \bar{b} (\partial_t - \delta \nabla^\sigma) b + \lambda \bar{a} a^2 + \lambda \bar{a}^2 a^2 + \lambda' Q \bar{b} a b + \lambda' \bar{a} b a b + (\bar{a} a_0 + \bar{b} b_0) \delta(t) \right\}, \quad (3.10)$$

де $\delta = D_A/D_B$, a та b – поля, що відповідають частинкам A та B , а поля \bar{a} та \bar{b} відіграють ту саму роль, що й допоміжні поля в підході Мартіна-Сіггія-Роуза для критичної динаміки [1]. Перший рядок (3.10) описує аномальний дифузійний рух частинок, а другий (без останнього доданку) відповідає реакціям. Спочатку константа $Q = 1/(2 - p)$ з'являється у доданку з анігіляцією/коагуляцією $\bar{a}a^2$, оскільки внесок коагуляції та анігіляції є $2\lambda_A + \lambda_C = (2 - p)\lambda$, а після перемасштабування ($a \rightarrow Qa$, $\bar{a} \rightarrow \bar{a}/Q$, $a_0 \rightarrow Qa_0$ [30, 142, 158]) ця константа запишеться біля доданку із реакцією захоплення $\bar{b}ab$. Останній член (3.10) відповідає пуассонівським початковим умовам при $t = 0$ із середніми густинами a_0 та b_0 . Простий аналіз розмірностей (3.10) показує, що верхня критична вимірність, нижче якої стають істотними флуктуаційні ефекти, є $d_c = \sigma$.

Середні для спостережуваних величин O в теорії поля з дією (3.10) можна обчислити за допомогою функціонального інтеграла

$$\langle O(t) \rangle = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}[a, b, \bar{a}, \bar{b}] O(a(t), b(t)) e^{-S}, \quad \mathcal{N} = \int \mathcal{D}[a, b, \bar{a}, \bar{b}] e^{-S}. \quad (3.11)$$

Нас цікавить середня густина частинок-мішеней $\langle b(t) \rangle$, а також кореляційна функція густина-густина $\tilde{C}_{BB}(r, t) = \frac{\langle b(r, t)b(0, t) \rangle - \langle b(t) \rangle^2}{\langle b(t) \rangle^2}$. Ми припускаємо, що на великих часах t густина частинок B має наступну скейлінгову поведінку у формі

$$\langle b(t) \rangle \sim t^{-\theta}. \quad (3.12)$$

у той час як кореляційна функція густини має таку

$$\tilde{C}_{BB}(r, t) \sim t^\phi f(r/t^{1/\sigma}). \quad (3.13)$$

Обчислюючи спостережувані величини стандартними методами теорії збурень, ми будемо пертурбативні розклади за степенями констант зв'язку λ , λ' і виражаємо їх у формі діаграм Фейнмана, використовуючи будівельні елементи, які наведені на рис. 3.1. Стандартним способом є групування діаграм для кожної величини, що розраховується за кількістю петель. Існує нескінченна кількість таких діаграм. Деревовидні (безпетлеві) діаграми важливі для розрахунку як густини в середньо-польовому наближенні, так і так званих одягнених пропагаторів, що

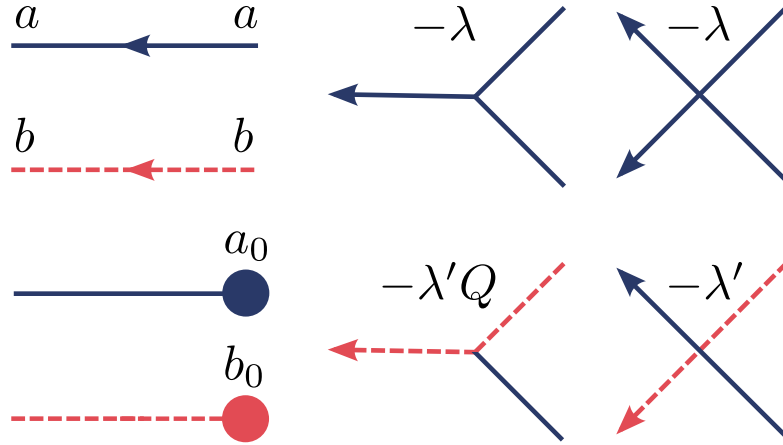


Рис. 3.1. Будівельні блоки для діаграм Фейнмана теорії з дією (3.10): пропагатори (лівий стовпець) і вершини.

дозволяють оцінити нескінченні суми, отримані в рамках теорії збурень [1]. Таким чином за допомогою рівнянь Дайсона (див. графічне представлення на рис. 3.2) отримаємо густини $\langle a(t) \rangle_{tr}$ та $\langle b(t) \rangle_{tr}$ у деревовидному (середньо-польовому) наближенні:

$$\begin{aligned} \langle a(t) \rangle_{tr} &= \frac{a_0}{1 + \lambda a_0 t}, \\ \langle b(t) \rangle_{tr} &= \frac{b_0}{(1 + \lambda a_0 t)^{Q\lambda'/\lambda}}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

У свою чергу, одягнені пропагатори отримані за допомогою рівнянь Дайсона (див. графічне представлення на рис. 3.2) матимуть такий вигляд:

$$\begin{aligned} G_{tr}^{AA}(\vec{k}, t_2, t_1) &= \Theta(t_2 - t_1) \left(\frac{1 + \lambda a_0 t_1}{1 + \lambda a_0 t_2} \right)^2 e^{-k^\sigma(t_2 - t_1)}, \\ G_{tr}^{BB}(\vec{k}, t_2, t_1) &= \Theta(t_2 - t_1) \left(\frac{1 + \lambda a_0 t_1}{1 + \lambda a_0 t_2} \right)^{Q\lambda'/\lambda} e^{-\delta k^\sigma(t_2 - t_1)}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

де $\Theta(x)$ – функція Гевісайда.

Деревовидні діаграми для кореляційної функції густина-густина \tilde{C}_{BB} показані на рис. 3.3

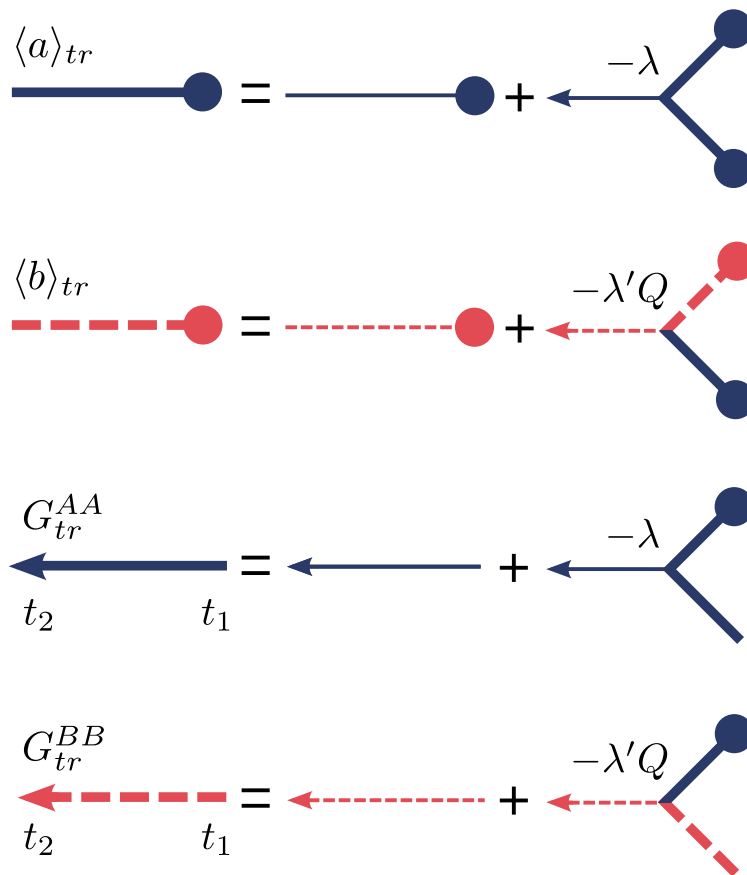


Рис. 3.2. Діаграмне представлення рівнянь Дайсона для густин на деревовидному рівні (середнє поле) $\langle a(t) \rangle_{tr}$ та $\langle b(t) \rangle_{tr}$ (два верхніх рядки), а також одягнених пропaгаторів G_{tr}^{AA} та G_{tr}^{BB} (два нижні рядки).

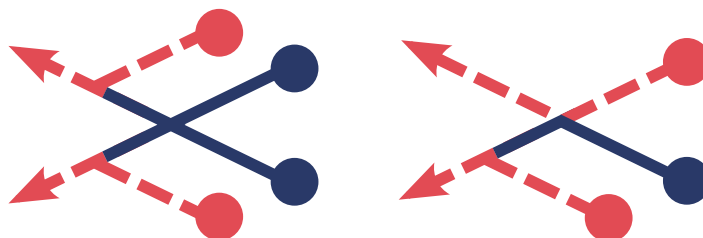


Рис. 3.3. Деревовидні діаграми для кореляційної функції густина-густина C_{BB} .

3.2.1. Ренормалізація

Діаграми, що містять петлі, стають розбіжними нижче $d_c = \sigma$ в границі великих часів $t \rightarrow \infty$. Ці розбіжності можна усунути перенормуванням констант зв'язку λ та λ' . Виявляється, що всі вершини в дії (3.10) перенормуються ідентично, що приводить до нескінченних діаграмних рядів для перенормованих вершин, які можна отримати за допомогою рівняння Бете-Солпітера, що дає в результаті:

$$\lambda_R(\vec{k} = 0, s) = \frac{\lambda}{1 + \lambda I_1(\vec{k} = 0, s)} = \frac{\lambda}{1 + \lambda C_1 \Gamma(\epsilon/\sigma) s^{-\epsilon/\sigma}}, \quad (3.16)$$

$$\lambda'_R(\vec{k} = 0, s) = \frac{\lambda'}{1 + \lambda' I_2(\vec{k} = 0, s)} = \frac{\lambda'}{1 + \lambda' C_2 \Gamma(\epsilon/\sigma) s^{-\epsilon/\sigma}}, \quad (3.17)$$

з $\epsilon = \sigma - d$ та

$$C_1 = \frac{4}{2^{d/\sigma}} \frac{\Gamma(d/\sigma)}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(d/2) \sigma}, \quad (3.18)$$

$$C_2 = \frac{2}{(1 + \delta)^{d/\sigma}} \frac{\Gamma(d/\sigma)}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(d/2) \sigma}. \quad (3.19)$$

Величини $I_1(\vec{k}, s)$ та $I_2(\vec{k}, s)$ у знаменниках рівнянь (3.16) та (3.17) є перетвореннями Лапласа однопетлевих інтегралів

$$I_1(\vec{k}, t) = 2 \int \frac{dk_1 dk_2}{(2\pi)^d} \hat{\delta}(k - k_1 - k_2) e^{-k_1^\sigma t} e^{-k_2^\sigma t},$$

$$I_2(\vec{k}, t) = \int \frac{dk_1 dk_2}{(2\pi)^d} \hat{\delta}(k - k_1 - k_2) e^{-k_1^\sigma t} e^{-\delta k_2^\sigma t},$$

де $\hat{\delta}(\dots)$ – дельта-функція Дірака.

Використовуючи стандартні методи, ми вводимо параметр перенормування κ та означуємо безрозмірні константи зв'язку $g_0 = \lambda \kappa^{-\epsilon}$ і $g'_0 = \lambda' \kappa^{-\epsilon}$ при $s = \kappa^\sigma$, $k = 0$ [162]. З (3.16) та (3.17) ми отримуємо:

$$g_R = \frac{g_0}{1 + g_0/g_*}, \quad g'_R = \frac{g'_0}{1 + g'_0/g'_*}, \quad (3.20)$$

де нерухомі точки g_* та g'_* :

$$g_* = [C_1 \Gamma(\epsilon/\sigma)]^{-1} = \frac{1}{2} (4\pi)^{\sigma/2} \Gamma(\sigma/2) \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.21)$$

$$g'_* = [C_2\Gamma(\epsilon/\sigma)]^{-1} = \frac{1}{2}(4\pi)^{\sigma/2}(1+\delta)\Gamma(\sigma/2)\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (3.22)$$

Далі ми описуємо перенормування для густини та кореляційної функції густина-густина частинок B , вводячи фактори перенормування Z_b та Z_{b^2} . Зокрема, гола (неперенормована) густина пов'язана з перенормованою через $b_B = Z_b b_R$, де $Z_b = Z_b(g_R, g'_R)$ вибрано таким чином, щоб розклади перенормованої густини не мали розбіжностей за ϵ . Перенормування кореляційної функції пов'язане з квадратом поля, оскільки фактор перенормування Z_{b^2} не еквівалентний $(Z_b)^2$ [30, 158]. У подальших розрахунках ми працюємо з неперемасштабованою кореляційною функцією, враховуючи $C_{BB}(\vec{r}, t) = \langle b(\vec{r}, t)b(0, t) \rangle - \langle b(t) \rangle^2$, і, для зручності, у просторі Фур'є $\hat{C}_{BB}(\vec{k}, t) = \int d^d x C_{BB}(\vec{r}, t) e^{i\vec{k}\vec{r}}$ при нульових зовнішніх імпульсах $\vec{k} = 0$. З урахуванням (3.13) отримуємо

$$\hat{C}_{BB}(k=0, t) \sim t^{\phi-2\theta+d/\sigma}. \quad (3.23)$$

Тоді гола кореляційна функція пов'язана з перенормованою через $\hat{C}_{BB}^B = Z_{b^2} \hat{C}_{BB}^R$, де $Z_{b^2} = Z_{b^2}(g_R, g'_R)$.

Визначаючи Z_b та Z_{b^2} , ми можемо знайти скейлінгові показники для густини частинок B та кореляційної функції густина-густина [30, 158]. Величини, які нас цікавлять (густина та кореляційна функція), повинні бути незалежними від вибору параметра перенормування κ , використовуючи розмірний аналіз, ми отримуємо РГ рівняння:

$$\left[\sigma t \frac{\partial}{\partial t} - a_0 d \frac{\partial}{\partial a_0} + \beta(g_R) \frac{\partial}{\partial g_R} + \beta(g'_R) \frac{\partial}{\partial g'_R} + \gamma_b(g_R, g'_R) \right] b_R(t, a_0, g_R, g'_R; \kappa) = 0, \quad (3.24)$$

$$\left[\sigma t \frac{\partial}{\partial t} - a_0 d \frac{\partial}{\partial a_0} + \beta(g_R) \frac{\partial}{\partial g_R} + \beta(g'_R) \frac{\partial}{\partial g'_R} + \gamma_{b^2}(g_R, g'_R) - d \right] \hat{C}_{BB}^R(t, a_0, g_R, g'_R; \kappa) = 0, \quad (3.25)$$

з β -функціями:

$$\beta(g_R) \equiv \kappa \frac{\partial g_R}{\partial \kappa} = -\epsilon g_R + \frac{\epsilon}{g_*} g_R^2, \quad (3.26)$$

$$\beta(g'_R) \equiv \kappa \frac{\partial g'_R}{\partial \kappa} = -\epsilon g'_R + \frac{\epsilon}{g'_*} g'^2_R. \quad (3.27)$$

Нерухомі точки цих β -функцій (3.21) та (3.22) стійкі для $d < d_c = \sigma$. γ -функції в (3.24) та (3.25) означають аномальну вимірність при обчисленні нерухомих точок g_* та g'_* :

$$\gamma_b(g_R, g'_R) = \kappa \frac{\partial}{\partial \kappa} \ln Z_b, \quad (3.28)$$

$$\gamma_{b^2}(g_R, g'_R) = \kappa \frac{\partial}{\partial \kappa} \ln Z_{b^2}. \quad (3.29)$$

Розв'язуючи рівняння (3.24) та (3.25) методом характеристик, знаходимо такі асимптотичні розв'язки:

$$b_R(t, a_0, g_R, g'_R; \kappa) \sim (\kappa^\sigma t)^{-\gamma_b^*/\sigma} b_R(\kappa^{-\sigma}, a_0(\kappa^\sigma t)^{d/\sigma}, \tilde{g}_R, \tilde{g}'_R; \kappa), \quad (3.30)$$

$$\hat{C}_{BB}^R(t, a_0, g_R, g'_R; \kappa) \sim (\kappa^\sigma t)^{d/\sigma - \gamma_{b^2}^*/\sigma} \hat{C}_{BB}^R(\kappa^{-\sigma}, a_0(\kappa^\sigma t)^{d/\sigma}, \tilde{g}_R, \tilde{g}'_R; \kappa), \quad (3.31)$$

де $\gamma_b^* = \gamma_b(g_*, g'_*)$, $\gamma_{b^2}^* = \gamma_{b^2}(g_*, g'_*)$, \tilde{g}_R та \tilde{g}'_R – біжучі константи зв'язку, які йдуть від $t \rightarrow \infty$ до нерухомих значень g_* та g'_* . Таким чином, асимптотична залежність від часу голої густини та голої кореляційної функції визначається перенормованим a_0 та аномальними вимірностями γ_b^* та $\gamma_{b^2}^*$ (подібно до [30, 158]).

Перед тим як розглянути результати для густини частинок B та кореляційної функції густина-густина з урахуванням однопетлевих внесків, ми коротко обговоримо наближення Смолюховського [16–18] для досліджуваної реакційно-дифузійної системи.

3.2.2. Наближення Смолюховського

Як ми вже згадували раніше, одним із методів, які широко використовуються для дослідження флуктуаційних ефектів у різних реакційно-дифузійних системах для вимірностей нижче критичної та при критичній ($d \leq d_c$), є теорія Смолюховського [16–18]. Основна ідея підходу Смолюховського – це пов'язати

константи реакції та константи дифузії, припускаючи, що частинки взаємодіють одна з одною на певній фіксованій відстані (див., наприклад, [139, 141–143]). Для кількох простих реакційно-дифузійних моделей цей підхід передбачає правильні показники загасання густини на великих часах (наприклад, для односортої реакції анігіляції [16]), але цей підхід все ще не дозволяє кількісно обчислити амплітуди.

Тут ми коротко обговорюємо наближення Смолюховського для досліджуваної двосортої реакційно-дифузійної моделі (3.1) у випадку, коли частинки дифундують як польоти Леві. У теорії Смолюховського частинки можуть миттєво взаємодіяти одна з одною на фіксованій відстані, і, таким чином, константи реакцій λ та λ' замінюються їхніми ефективними аналогами, пов'язаними з дифузією частинок. Використовуючи ймовірністний підхід (в англомовній літературі т. з. the first return probabilities) для нашої системи з польотами Леві при вимірностях $d < d_c = \sigma$ можемо отримати

$$\lambda = \text{const} \times t^{d/\sigma-1}, \quad (3.32)$$

$$\lambda' = \text{const} \times \left(\frac{1+\delta}{2}\right)^{d/\sigma} t^{d/\sigma-1}, \quad (3.33)$$

де $\delta = D_A/D_B$ у нашому випадку відношення дифузійних констант D_A та D_B , що пов'язані з польотами Леві. Підставляючи ці результати у кінетичні рівняння для середніх густин $\langle a \rangle$ та $\langle b \rangle$

$$\frac{\partial \langle a \rangle}{\partial t} = -\lambda \langle a \rangle^2, \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial \langle b \rangle}{\partial t} = -2Q\lambda' \langle b \rangle \langle a \rangle, \quad (3.35)$$

і розв'язуючи їх відносно середньої густини частинок B , ми отримуємо наступну поведінку для $d < \sigma$:

$$\langle b \rangle_S \sim t^{-\theta_S}, \quad (3.36)$$

з

$$\theta_S = \frac{2d}{\sigma(2-p)} \left(\frac{1+\delta}{2}\right)^{d/\sigma}. \quad (3.37)$$

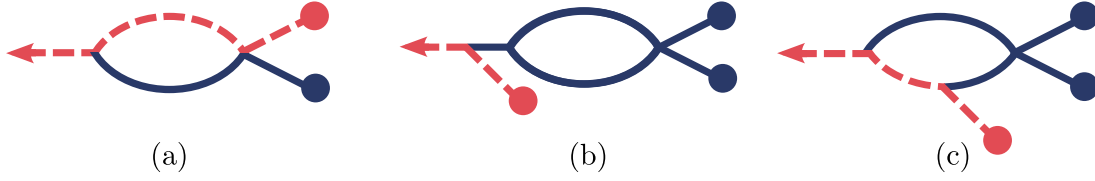


Рис. 3.4. Діаграми, що представляють однопетлеві внески до густини частинок-мішеней B $\langle b(t) \rangle$

Як обговорюється в літературі, на відміну від середнього поля, наближення Смолюховського коректніше визначає універсальні властивості величин, що описують реакційно-дифузійні системи у дифузійно-обмеженому режимі і сам підхід є доволі простим при розрахунках. Але, незважаючи на зручність цієї теорії, такий підхід може передбачити помилкові результати для більш складної системи. Зокрема, теорія Смолюховського не дозволяє отримати правильні показники для змішаних реакцій (детальніше див. [4]). Крім того, це наближення дає неправильні результати для добре відомих точно розв'язуваних моделей (див., наприклад, [144, 145]). Ренормгруповий формалізм, хоч і складніший, але дозволяє вийти за межі наближення Смолюховського.

3.3. Ренормгрупові результати

3.3.1. Густина частинок-мішеней

Розрахувавши однопетлеві внески до густини частинок-мішеней B , що можна представити діаграмами, зображеними на рис. 3.4, ми отримали наступні результати у границі $a_0 \rightarrow \infty$:

$$(a) = \frac{\lambda'^2 Q b_0}{\lambda (a_0 \lambda t)^{Q \lambda' / \lambda}} \frac{\Gamma(d/\sigma)}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(d/2)} t^{\epsilon/\sigma} \frac{2}{(1+\delta)^{d/\sigma}} \frac{\sigma^2}{\epsilon^2 (\epsilon + \sigma)} \quad (3.38)$$

$$(b) = -\frac{\lambda' Q b_0}{(a_0 \lambda t)^{Q \lambda' / \lambda}} \frac{\Gamma(d/\sigma)}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(d/2)} \lambda' t^{\epsilon/\sigma} \frac{8}{2^{d/\sigma} \epsilon^2 (\epsilon + \sigma)^2 (\epsilon + 2\sigma)} \frac{\sigma^4}{\sigma^4} \quad (3.39)$$

$$(c) = \frac{\lambda'^2 Q^2 b_0}{\lambda (a_0 \lambda t)^{Q \lambda' / \lambda}} \frac{\Gamma(d/\sigma)}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(d/2)} \lambda' t^{\epsilon/\sigma} \frac{1}{(1+\delta)^{d/\sigma-1}} \left(\frac{f(\delta)}{\epsilon} + O(\epsilon) \right), \quad (3.40)$$

де $f(\delta)$ має наступний вигляд:

$$f(\delta) = 1 + 2\delta \left[\ln \left(\frac{2}{\delta + 1} \right) - 1 \right] + (1 - \delta^2) \left[\text{Li}_2 \left(\frac{\delta - 1}{\delta + 1} \right) - \frac{\pi^2}{6} \right], \quad (3.41)$$

тут $\text{Li}_2(\dots)$ – полілогарифмічна функція. Функція $f(\delta)$ має ту ж форму, що й у випадку двосортної реакційно-дифузійної системи зі звичайною дифузиею [30, 142, 158]. Результати для перших двох діаграм були отримані в [252, 253], для третьої діаграми ми розрахували провідний внесок при $\epsilon \rightarrow 0$.

На наступному кроці ми розкладаємо (3.38) – (3.40) за степенями ϵ та збираємо внески, які розбігаються при $\epsilon \rightarrow 0$. Далі об'єднуючи отримані розклади з середньопольовими результатами, ми отримаємо

$$b_B = \frac{b_0}{(a_0 \lambda t)^{Qz}} \left[1 + \lambda t^{\epsilon/\sigma} \left(\frac{\mathcal{A}(z)}{\epsilon^2} + \frac{\mathcal{B}(z)}{\epsilon} + \dots \right) \right]. \quad (3.42)$$

де ми ввели $z \equiv \lambda'/\lambda = g'_0/g_0$. $\mathcal{A}(z)$ та $\mathcal{B}(z)$ у (3.42) мають наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(z) &= 2\sigma Qz \frac{1}{(4\pi)^{d/2}} \frac{\Gamma(d/\sigma)}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{z}{(1+\delta)^{d/\sigma}} - \frac{2}{2^{d/\sigma}} \right), \\ \mathcal{B}(z) &= Qz \frac{1}{(4\pi)^{d/2}} \frac{\Gamma(d/\sigma)}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{5}{2^{d/\sigma-1}} - \frac{2z}{(1+\delta)^{d/\sigma}} + \frac{Qz}{(1+\delta)^{d/\sigma-1}} f(\delta) \right) \end{aligned} \quad (3.43)$$

з $f(\delta)$ заданим рівнянням (3.41). Внесками, пропорційними до $1/\epsilon^2$ у (3.42) можна знехтувати, оскільки нас цікавить поведінка в нерухомій точці, де:

$$z^* = \frac{g'_*}{g_*} = 2 \left(\frac{1+\delta}{2} \right)^{d/\sigma} \underset{d \rightarrow \sigma}{=} 1 + \delta + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (3.44)$$

Тому доданок $\mathcal{A}(z)$ дорівнює нулю при $z \rightarrow z^*$, оскільки він пропорційний $\propto (z - z^*)$.

Враховуючи внески пропорційні до $1/\epsilon$, ми розкладаємо $\mathcal{B}(z)$ за степенями $z - z^*$, залишаючи лише головні члени. В результаті ми отримуємо:

$$\mathcal{B}(z^*) = \frac{1}{(4\pi)^{\sigma/2} \Gamma(\sigma/2)} [3Q(1+\delta) + Q^2(1+\delta)^2 f(\delta)] + \mathcal{O}(\epsilon, z - z^*). \quad (3.45)$$

Далі ми застосовуємо стандартні кроки, замінюючи $t \rightarrow \kappa^{-\sigma}$, $a_0 \rightarrow a_0(\kappa^{\sigma t})^{d/\sigma}$, $\lambda \rightarrow \kappa^\epsilon g_0 = \kappa^\epsilon (g_R + g_R^2/g_* + \dots)$ у рівнянні (3.42) та розкладаючи

отриманий вираз за степенями перенормованих констант зв'язку g_R та g'_R . Таким чином ми знаходимо наступний вираз для голої густини у лінійному наближенні для перенормованих констант:

$$b_B = \frac{b_0}{(a_0 g_R t^{d/\sigma})^{Q g'_R/g_R}} \left[1 + \frac{\mathcal{B}(z^*)}{\epsilon} g_R - \frac{Q}{g_*} g'_R + \dots \right]. \quad (3.46)$$

Як видно з розкладу (3.46), необхідно перенормувати поле за рахунок появи члена, пропорційного до $1/\epsilon$, який дозволяє ідентифікувати константу перенормування Z_b . Тому в лінійному наближенні за перенормованими константами зв'язку g_R та g'_R , а також $1/\epsilon$ константа Z_b записується як:

$$Z_b = 1 + \frac{\mathcal{B}(z^*)}{\epsilon} g_R - \frac{Q}{g_*} g'_R + \dots, \quad (3.47)$$

і, відповідно, з (3.47) ми отримуємо

$$\gamma_b = -\mathcal{B}(z^*) g_R + \frac{2Q}{(4\pi)^{\sigma/2} \Gamma(\sigma/2)} g'_R. \quad (3.48)$$

Використовуючи розраховані у нерухомій точці константи зв'язку g_* та g'_* (3.21), (3.22), ми остаточно запишемо

$$\gamma_b^* = - \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1+\delta}{2-p} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1+\delta}{2-p} \right)^2 f(\delta) \right] \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.49)$$

де ми використали позначення $Q = 1/(2-p)$. Порівнюючи отриманий результат (3.49) для двосортної реакційно-дифузійної системи з польотами Леві з результатом для такої ж системи, але зі звичайними короткосяжними дифузійними стрибками, ми знаходимо точно такий самий показник (в першому порядку за ϵ) [30, 158].

І, нарешті, перенормована густина має таку поведінку:

$$b_R = Z_b^{-1} b_B \sim t^{-dQz^*/\sigma - \gamma_b^*/\sigma} = t^{-\theta}, \quad (3.50)$$

де перший член dQz^*/σ у нерухомій точці (3.44) відповідає показнику, отриманому з наближення Смолюховського (опис цього наближення для нашої моделі ми навели у попередньому підрозділі 3.2.2, де наближення Смолюховського для

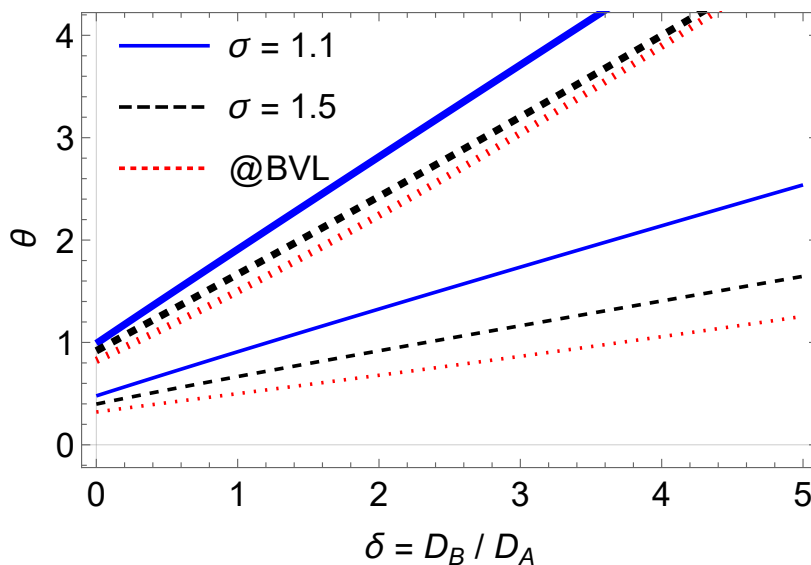


Рис. 3.5. Показник загасання θ густини частинок-мішеней B як функція відношення констант дифузії $\delta = D_B/D_A$ в одновимірному випадку $d = 1$. Верхній набір кривих (товсті лінії) відповідає випадку $A + A \rightarrow A$ (коагуляція), тоді як нижній (тонкі лінії) – відповідає випадку $A + A \rightarrow 0$ (анігіляція). Суцільні криві побудовані для $\sigma = 1.1$, а штрихові – для $\sigma = 1.5$, тоді як пунктирні криві (@BVL) відповідають випадку короткосяжних дифузійних стрибків [30, 158].

θ передбачає результат (3.37)), а другий член є результатом перенормування поля, пов'язаного з частинками B . В результаті ми маємо вираз для θ у першому порядку за $\epsilon = \sigma - d$:

$$\theta = \frac{2d}{\sigma(2-p)} \left(\frac{1+\delta}{2} \right)^{d/\sigma} + \frac{1}{2\sigma} \left[\left(\frac{1+\delta}{2-p} \right) + \left(\frac{1+\delta}{2-p} \right)^2 f(\delta) \right] (\sigma - d). \quad (3.51)$$

Зауважимо, що σ у знаменнику у рівнянні (3.51) приводить до збільшення показника θ зі зменшенням керуючого параметру σ , таким чином, до повільнішого загасання густини $\langle b \rangle$ для розподілу польотів Леві з більшою ймовірністю до довгосяжних стрибків, див. рис. 3.5. Крім того, порівнюючи (3.51) із результатом для звичайної короткосяжної дифузії [30, 158], ми бачимо, що наш результат (3.51) можна отримати з результатів робіт [30, 158] простою заміною $d_{\text{eff}} = 2d/\sigma$ замість d . Оскільки ми розглядаємо випадок $\sigma < 2$, то приходимо до висновку, що в системі, де і частинки-пастки, і частинки-мішені здійснюють польоти Леві, ймовірність вижити частинкам B є більшою.

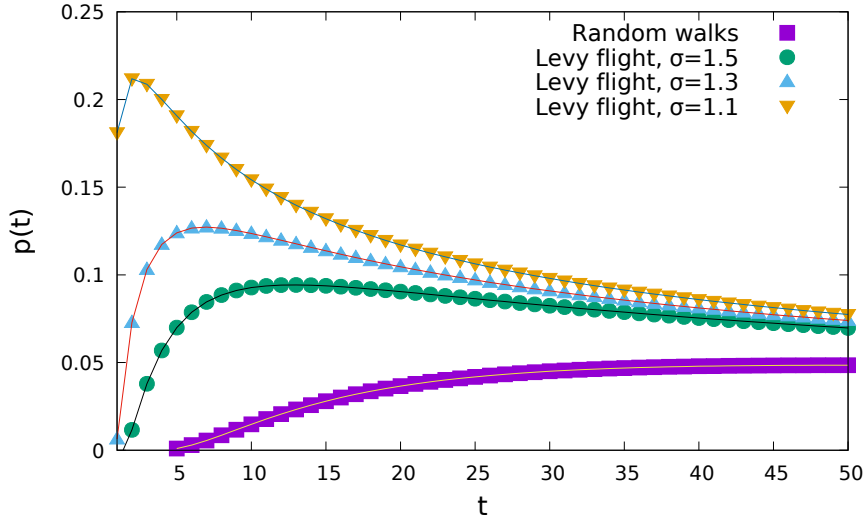


Рис. 3.6. Оцінка ймовірності для двох частинок, початково розділених відстанню $l_0 = 10$ на одновимірній ґратці, зустрітися в момент часу t . Показано випадки, коли дві частинки здійснюють прості випадкові блукання та польоти Леві з показниками $\sigma = 1.1$, $\sigma = 1.3$ та $\sigma = 1.5$.

Вищу ймовірність виживання частинок-мішеней B у випадку польотів Леві порівняно з такою ж системою, але у випадку звичайних короткосяжних дифузійних стрибків, можна зрозуміти зокрема розглянувши наступну допоміжну задачу. Нехай маємо одновимірну ґратку і нехай дві випадково блукаючі частинки A та B початково знаходяться на відстані $L_0 = l_0$. Оцінимо ймовірність їх зустрічі через t кроків. У момент часу t кожна частинка здійснює стрибок або вліво, або вправо з ймовірністю $1/2$. В результаті можна отримати або збільшення відстані між ними ($L_t = L_{t-1} + 2$, якщо дві частинки стрибають у протилежних напрямках), або зменшення відстані між ними ($L_t = L_{t-1} - 2$, якщо обидві частинки стрибають назустріч одна одній), або ж відстань між частинками не зміниться ($L_t = L_{t-1}$, якщо обидві рухаються одночасно або ліворуч, або праворуч). Ймовірності цих трьох випадків відповідно $p_+ = p_- = 1/4$, $p_0 = 1/2$. Позначимо через t_+ , t_- та t_0 кількість разів, коли частинки здійснюють взаємні стрибки кожного з цих трьох типів, так що $t = t_+ + t_- + t_0$. Оскільки частинки зустрічаються, коли відстань між ними $L_t = 0$, то отримаємо наступну умову: $l_0 + 2t_+ - 2t_- = 0$. В результаті

отримаємо, що ймовірність зустрічі частинок через t кроків є:

$$P(t, t_+, t_-) = \frac{t!}{t_+!t_-!(t - t_+ - t_-)!} \left(\frac{1}{4}\right)^{t_+} \left(\frac{1}{4}\right)^{t_-} \left(\frac{1}{2}\right)^{t-t_+-t_-} \quad t_- = \frac{l_0}{2} + t_+. \quad (3.52)$$

Таким чином, виконавши у рівнянні (3.52) підсумовування за t_+ , ми отримуємо ймовірність $p(t)$ зустрічі двох випадково блукаючих частинок (див. оцінку цієї ймовірності на рис. 3.6 у випадку $l_0 = 10$). Тепер узагальнимо на випадок, коли обидві частинки здійснюють польоти Леві. Усереднену довжину l_{av} кожного стрибка можна оцінити на основі усічених польотів Леві [254, 255]. Отож, подібно до випадкових блукань, відстань між частинками збільшується, коли вони стрибають у протилежних напрямках ($L_t = L_{t-1} + 2l_{av}$) та зменшується, коли вони стрибають на зустріч одна одній ($L_t = L_{t-1} - 2l_{av}$). В результаті, замінюючи l_0 на l_0/l_{av} у виразі (3.52), ми можемо знайти ймовірність зустрічі частинок через t кроків, коли обидві здійснюють польоти Леві. Наприклад, нехай $l_{max} = 15000$, тоді ми отримуємо з розподілу усічених польотів Леві: $l_{av}(\sigma = 1.5) = 1.94$, $l_{av}(\sigma = 1.3) = 2.61$, $l_{av}(\sigma = 1.1) = 4.33$. Відповідні оцінки ймовірностей наведені на рис. 3.6. Положення максимуму $P(t)$ зміщується в бік менших значень t зі зменшенням параметра σ , а, отже, у випадку польотів Леві частота зустрічей частинок збільшується у порівнянні зі звичайними випадковими блуканнями.

3.3.2. Кореляційна функція густина-густина частинок-мішеней

Тепер розрахуємо однопетлеві внески до кореляційної функції густина-густина $\hat{C}_{BB}(k = 0)$ частинок-мішеней B . Усі можливі діаграми шести топологічних класів схематично представлені на рис. 3.7 (див. також [30, 158]). Результати розрахунку полюсів у $\epsilon = \sigma - d$ можна представити у наступному вигляді:

$$\hat{C}_{BB}^{1-loop}(k = 0) = \frac{1}{3(4\pi)^{d/2}} \frac{\Gamma(d/\sigma)}{\Gamma(d/2)} \frac{b_0^2 Q \lambda'^2}{(a_0 \lambda t)^{2Q\lambda'/\lambda}} t^{1+\epsilon/\sigma} \sum_{i=1}^6 F_i(z, \epsilon, \sigma), \quad (3.53)$$

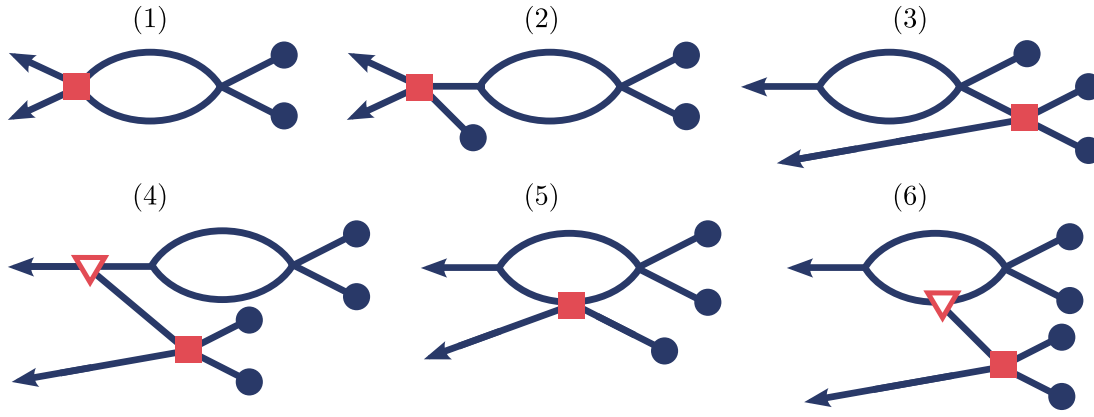


Рис. 3.7. Однопетлеві внески до кореляційної функції гущина-гущина, які представлені діаграмами шістьох топологічних класів (без розрізнення між лініями A та B), де триточкові вершини показані порожніми трикутниками, а чотириточкові – зафарбованими прямокутниками. Детальніше див. [30, 158].

де F_i – усі можливі внески до $\hat{C}_{BB}(k=0)$ від діаграм шести топологічних класів, а $z = \lambda'/\lambda$:

$$F_1 = \left(4Q - \frac{6z}{1+\delta}\right) \frac{1}{\epsilon}, \quad (3.54)$$

$$F_2 = 6\sigma Qz \left(\frac{z}{1+\delta} - 1\right) \frac{1}{\epsilon^2} + \left(6 - 8Q + 24Qz + 3Q^2z^2 f(\delta) - 15\frac{Qz^2}{1+\delta}\right) \frac{1}{\epsilon}, \quad (3.55)$$

$$F_3 = \left(6 - \frac{14}{3}Q + \frac{-6z + 8Qz + 15Qz^2 - 10Q^2z^2}{1+\delta}\right) \frac{1}{\epsilon}, \quad (3.56)$$

$$F_4 = 6\sigma Qz \left(1 - \frac{4Q}{3}\right) \left(\frac{z}{1+\delta} - 1\right) \frac{1}{\epsilon^2} + \left(-6 + \frac{28Q}{3} + 6Qz - 20Q^2z + (3Q^2z^2 - 4Q^3z^2) f(\delta) + \frac{6}{1+\delta} (3Q^2z^2 - 2Qz^2)\right) \frac{1}{\epsilon}, \quad (3.57)$$

з $f(\delta)$ заданим рівнянням (3.41); тут $F_5 = 0$, а також $F_6 = 0$, оскільки у цих класах немає діаграм з полюсами за ϵ .

Деревовидні діаграми (див. рис. 3.3) разом із однопетлевими діаграмами (див. рис. 3.7) приводять до наступного результату для голої кореляційної функції

густина-густина частинок-мішеней B у границі великих a_0 :

$$\hat{C}_{BB}^B = \frac{b_0^2 h(Q) t}{(a_0 \lambda t)^{2Qz}} z \lambda' \left[1 + \lambda t^{\epsilon/\sigma} \left(\frac{2\mathcal{A}(z)}{\epsilon^2} + \frac{\mathcal{C}(z)}{\epsilon} + \dots \right) \right], \quad (3.58)$$

де $h(Q) = Q(1 - 2Q/3)$. Ми можемо опустити внески, пропорційні до $1/\epsilon^2$ з тієї ж причини, що й при розрахунку густини, тоді як зібравши доданки, які пропорційні до $1/\epsilon$ у рівняннях (3.54) – (3.57), ми отримаємо

$$\mathcal{C}(z^*) = \frac{2}{(4\pi)^{\sigma/2} \Gamma(\sigma/2)} \left[-\frac{9 - 13Q}{3(3 - 2Q)} \right] + 2\mathcal{B}(z^*) + \mathcal{O}(\epsilon, z - z^*). \quad (3.59)$$

Далі ми повторюємо тіж кроки, які ми виконали для густини, щоб знайти константу перенормування Z_{b^2} :

$$Z_{b^2} = 1 + \left(\frac{\mathcal{C}(z^*)}{\epsilon} - \frac{1}{g_*} \right) g_R + 2 \left(\frac{1}{g'_*} - \frac{Q}{g_*} \right) g'_R. \quad (3.60)$$

Тому з (3.29) ми маємо:

$$\gamma_{b^2} = \left(-\mathcal{C}(z^*) + \frac{2}{(4\pi)^{\sigma/2} \Gamma(\sigma/2)} \right) g_R + \frac{4}{(4\pi)^{\sigma/2} \Gamma(\sigma/2)} \left(Q - \frac{1}{1 + \delta} \right) g'_R. \quad (3.61)$$

І нарешті, γ_{b^2} у нерухомих точках g_* та g'_* , заданих рівняннями (3.21) та (3.22), разом із $Q = 1/(2 - p)$ запишеться як

$$\gamma_{b^2}^* = - \left[\frac{7}{12 - 9p} + \frac{1 + \delta}{2 - p} + \left(\frac{1 + \delta}{2 - p} \right)^2 f(\delta) \right] \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (3.62)$$

Таким чином перенормована кореляційна функція густина-густина частинок-мішеней B має наступну поведінку:

$$\hat{C}_{BB}^R(k = 0) \sim t^{d/\sigma - 2dQz^*/\sigma - \gamma_{b^2}^*/\sigma}. \quad (3.63)$$

Порівнюючи отриману поведінку (3.63) зі скейлінгом (3.23), ми знаходимо, що показник ϕ має наступний вигляд:

$$\phi = \frac{2}{\sigma} \left(\gamma_b^* - \frac{1}{2} \gamma_{b^2}^* \right) = \frac{7}{\sigma(12 - 9p)} \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (3.64)$$

Обернена залежність показника ϕ (3.64) від σ (див. також рис. 3.8) показує, що в системі з польотами Леві, які характеризуються меншими значеннями σ , частинки B більш скорельовані у часі, ніж у системі з більшим значенням параметру

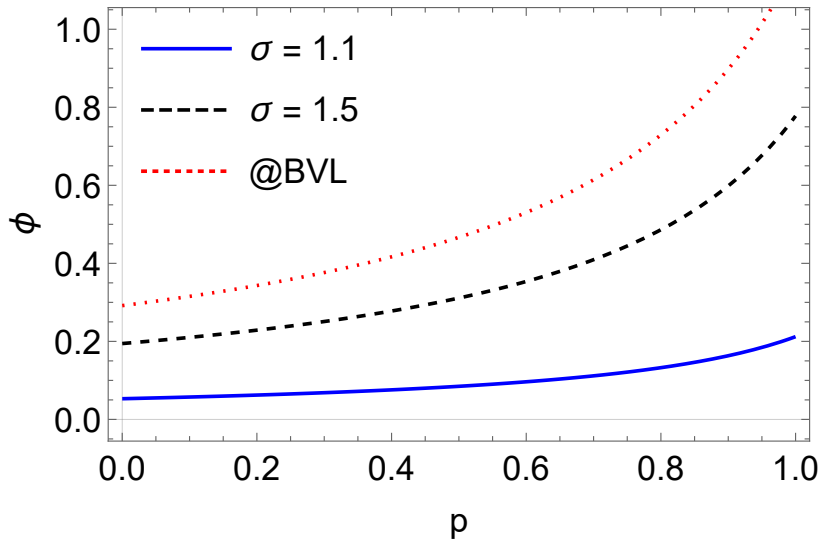


Рис. 3.8. Показник ϕ кореляційної функції густина-густина частинок-мішеней B як функція ρ в одновимірному випадку $d = 1$. Суцільна крива побудована для $\sigma = 1.1$, а штрихова – для $\sigma = 1.5$, тоді як пунктирна крива (@BVL) є результатом для випадку звичайних дифузійних стрибків [30, 158].

σ . Як наслідок, ми бачимо, що в системі зі звичайною дифузією частинки-мішені в часі менш скорельовані, ніж в системі з польотами Леві. Крім того, так само, як і у випадку показника загасання густини, порівнюючи (3.64) із результатом для звичайної дифузії [30, 158], ми бачимо, що його можна отримати з ϕ у випадку звичайної короткосяжної дифузії, замінивши d на $d_{\text{eff}} = 2d/\sigma$.

3.4. Комп'ютерний експеримент у одновимірному випадку

У цьому підрозділі ми порівняємо отримані у попередніх підрозділах аналітичні результати показника загасання густини частинок B з результатом, який знайдемо з комп'ютерного експерименту.

Аналіз особливостей двосортної реакційно-дифузійної системи в рамках комп'ютерного експерименту ми розпочнемо з дискретного представлення моделі на основі одновимірної ґратки (ланцюжка), що містить $N = 10^5$ вузлів. У кожен дискретний момент часу t i -му вузлу призначаються мітки $n_A(i, t)$ та $n_B(i, t)$, коли вузол містить n частинок або сорту A , або сорту B , або 0 якщо вузол є порожнім.

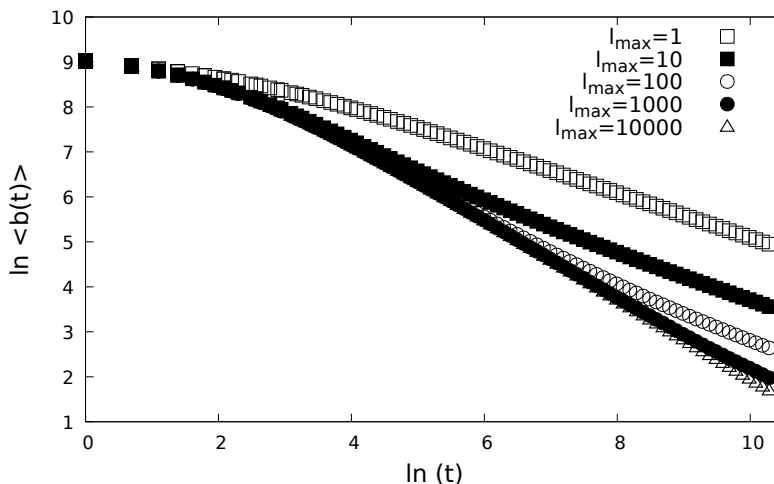


Рис. 3.9. Середня густина частинок B як функція t у подвійному логарифмічному масштабі при фіксованих параметрах $\delta = 1$, $\sigma = 1.1$ та ймовірності коагуляції $p = 0$ при різних l_{\max} . Спостерігається перехід від асимптотичного режиму у випадку звичайної дифузії (при $l_{\max} = 1$) до статистики Леві.

Таким чином, густини частинок A та B визначаються як:

$$a(t) = \frac{1}{N} \sum_i n_A(i, t), \quad b(t) = \frac{1}{N} \sum_i n_B(i, t). \quad (3.65)$$

В момент часу $t = 0$ ми задаємо $a(0) = b(0) = 0.1$ як початкові густини частинок A та B , що осідають на випадково вибрані вузли ланцюжка.

Ми застосовуємо синхронну версію алгоритму оновлення клітинного автомата. Тут за один часовий крок відбувається прогін по всій системі. Оновлення часу $t - 1 \rightarrow t$ складається з двох кроків. На першому кроці ми перевіряємо стан кожного i -го вузла. Якщо він містить частинку ($n_C(i, t) > 0$ з $C = \{A, B\}$), то частинка робить стрибок на довжину l вправо або вліво, де l підкоряється статистиці Леві. В результаті такого стрибка маємо $n_C(i, t) = n_C(i, t - 1) - 1$ та $n_C(i \pm l, t) = n_C(i \pm l, t - 1) + 1$. Зауважимо, що оскільки система є скінченною, то ми вводимо обмеження на довжину стрибка l_{\max} так, що довжини беруться з наступної функції розподілу:

$$p(l) = \frac{l^{-(d+\sigma)}}{\sum_{l=1}^{l_{\max}} l^{-(d+\sigma)}}, \quad (3.66)$$

що відповідає так званим усіченим польотам Леві [254, 255].

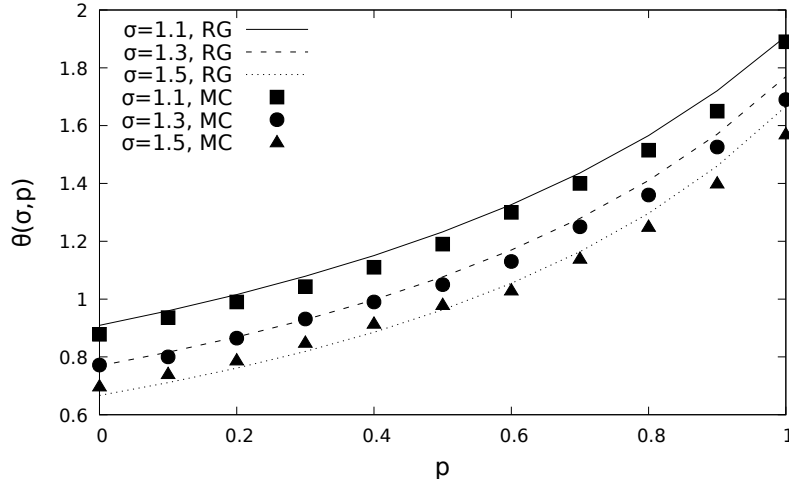


Рис. 3.10. Показник загасання густини θ частинок B як функція ймовірності коагуляції p при $\delta = 1$ та різних σ . Лініями позначені РГ результати, а символами – результати комп’ютерного експерименту.

Змінюючи параметр l_{\max} , ми спостерігаємо перехід від асимптотичного режиму у випадку звичайної дифузії (при $l_{\max} \ll T$) до статистики Леві. Зауважимо, що коли константи дифузії частинок A та B рівні ($\delta = 1$), то частинки обох сортів стрибають одночасно в кожен момент часу t . У іншому ж випадку частинки з меншими константами дифузії пропускають деякі моменти часу. Наприклад, у випадку $\delta = 2$ коефіцієнт дифузії частинок B вдвічі більший, і вони стрибають у два рази швидше порівняно з частинками A . Це можна зрозуміти таким чином, що при парних значеннях t і частинки A , і частинки B роблять стрибки, тоді як при непарних значеннях t стрибають лише B , а частинки A залишаються на тих самих вузлах, які вони займали в момент часу $t - 1$.

На другому кроці оновлення часу застосовуються правила реакції:

- якщо $n_A(i, t) = 1$ та $n_B(i, t) > 1$, тоді $n_B(i, t) = n_B(i, t) - 1$;
- якщо $n_A(i, t) = 2$, тоді $n_A(i, t) = 1$ з імовірністю p (коагуляція) або $n_A(i, t) = 0$ з імовірністю $1 - p$ (анігіляція).

Усереднення ансамблю $\langle(\dots)\rangle$ виконується за 1000 репліками.

На рис. 3.9 ми представляємо результати для середньої густини $\langle b(t) \rangle$ частинок-мішеней B для $\sigma = 1.1$ при різних параметрах l_{\max} . Оцінки для показни-

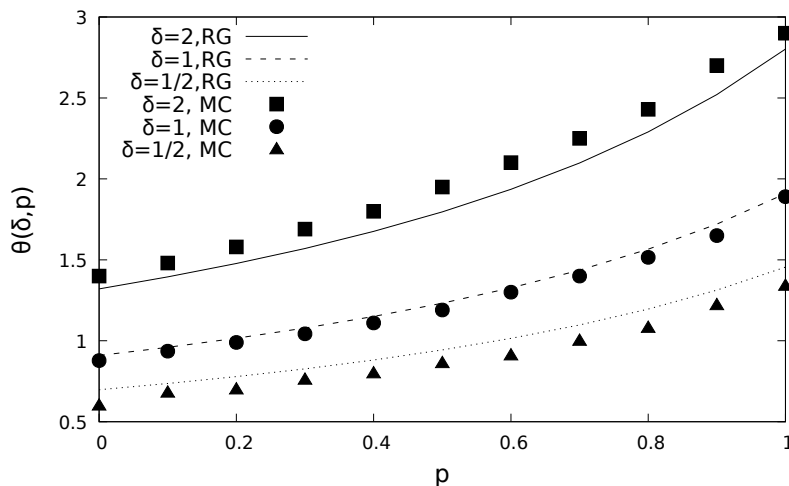


Рис. 3.11. Показник загасання густини θ частинок B як функція ймовірності коагуляції p при $\sigma = 1.1$ та різних δ . Лініями позначені РГ результати, а символами – результати комп’ютерного експерименту.

ка загасання густини θ отримані шляхом лінійної підгонки методом найменших квадратів до форми (3.12). При $l_{\max} = 1$ ми відтворюємо відомий результат для звичайної дифузії з $\theta(p = 0) = 0.5$. Як можна одразу помітити з рис. 3.9, збільшення максимальної довжини стрибка приводить до того, що густина частинок-мішеней зменшується швидше. Щоб отримати оцінки для показника θ у випадку статистики Леві, ми використали значення $l_{\max} = 15000$. Наші дані для θ як функції ймовірності коагуляції p при різних параметрах σ та δ представлені відповідно на рис. 3.10 та 3.11 у порівнянні з відповідними аналітичними результатами. При кожному фіксованому значенні ймовірності коагуляції p показник θ зростає зі збільшенням параметра σ . Нагадаємо, що чим менше σ , тим більша ймовірність виникнення дуже довгих стрибків і, отже, це якісно приводить до швидшого зменшення густини частинок-мішеней. Найкращий збіг між аналітичними та числовими оцінками отримано для випадку $\delta = 1$ (див. рис. 3.11) подібно до того, як це спостерігалось у випадку зі звичайною дифузією [30, 158]. Таким чином, наші чисельні результати підтверджують аналітичні РГ передбачення для густини частинок-мішеней у випадку польотів Леві.

3.5. Висновки до розділу

Ми розглянули двокомпонентну реакційно-дифузійну систему з реакціями $A + A \rightarrow (\emptyset, A)$ та $A + B \rightarrow A$ при наявності польотів Леві, які моделюють аномальну дифузію. Частинки перескакують з одного вузла d -мірною гіперкубічної ґратки на інший згідно розподілу Леві $P(r) \sim r^{-d-\sigma}$ з $0 < \sigma \leq 2$. Зі швидкістю реакції λ дві частинки A на одному й тому ж вузлі можуть анігілювати або коагулювати, у той час як ці ж частинки A можуть поглинати частинку B , зустрівшись на одному й тому ж вузлі, зі швидкістю реакції λ' (3.1). Попередні результати з короткосяжними дифузійними стрибками показали, що для вимірностей нижче критичних густина частинок B , а також кореляційна функція частинок B характеризуються нетривіальними динамічними показниками, що виникають в результаті перенормування поля у випадку густини частинок B і додаткового показника, що виникає в результаті перенормування квадрату поля, пов'язаного з частинками B , у випадку кореляційної функції густина-густина [30, 142, 158]. Ми розширили ці дослідження і також дослідження польотів Леві в подібних системах [162, 252, 253], замінивши короткосяжні дифузійні стрибки польотами Леві і зосередивши увагу на випадку $\sigma < 2$. Як було показано для реакції парної анігіляції в односортній системі [162], дифузійно-обмежений режим при такому наближенні може фізично реалізовуватись тільки у просторі $d = 1$.

Таким чином ми розглянули двокомпонентну реакційно-дифузійну систему з польотами Леві (3.1) нижче верхньої критичної вимірності ($d_c = \sigma$), де переважають флуктуації. Відображаючи таку двокомпонентну систему на теорію поля, ми також застосовуємо перенормування, оскільки діаграми Фейнмана з петлями при пертурбативному розкладі містять інфрачервоні розбіжності для великих часів нижче критичної вимірності. Тому ми усунули ці розбіжності шляхом перенормування мікроскопічних швидкостей реакції, пов'язаних з анігіляцією та коагуляцією частинок, а також із захопленням частинок-мішеней B . Ми розрахували густину та кореляційну функцію густина-густина частинок B , отриманих з голих деревовидних та однопетлевих діаграм з подальшим перенормуванням. В резуль-

таті перенормування поля та квадрату поля, пов'язаних з частинками-мішенями B , приводить до показників загасання, які включають додаткові показники як для густини частинок B , так і для кореляційної функції густина-густина, подібно до [30, 142, 158], але у випадку польотів Леві показники також характеризуються параметром σ , який керує формою розподілу Леві $P(r) \sim r^{-d-\sigma}$.

Наші аналітичні результати показують, що принаймні в однопетлевому наближенні отримані показники у випадку польотів Леві можна отримати з аналогічних виразів у випадку звичайної дифузії простою заміною вимірності простору d на ефективну: $d_{\text{eff}} = 2d/\sigma$. Це схоже на картину, що спостерігається для критичної поведінки систем із далекосяжними взаємодіями, де була запропонована наступна гіпотеза: критичні показники у випадку далекосяжної взаємодії можна отримати з виразів для критичних показників у випадку короткосяжної взаємодії, використовуючи замість просторової вимірності d ефективну, яка виражається через d та параметр загасання далекосяжної взаємодії (див. напр. [256, 257]).

Виконано також чисельне моделювання розглянутого реакційно-дифузійного процесу із застосуванням синхронної версії алгоритму оновлення клітинного автомата. В одновимірному випадку наші чисельні оцінки показника загасання густини частинок-мішеней підтверджують аналітичні прогнози для цього показника. Зокрема, вони показують, що ймовірність виживання частинок-мішеней в реакційно-дифузійному процесі з польотами Леві вища у порівнянні з випадком звичайної дифузії більша.

РОЗДІЛ 4

РІВНОВАЖНІ ВЛАСТИВОСТІ АДСОРБАТІВ, ЯКІ УТВОРЕНІ В ХОДІ КАТАЛІТИЧНО-АКТИВОВАНИХ РЕАКЦІЙ

У цьому розділі ми розглядаємо термодинамічні властивості адсорбатів, які утворені в ході каталітично-активованих реакцій $A + B \rightarrow \emptyset$ на одновимірних ланцюжках та деревовидних ґратках Бете і Фушімі. У випадку одновимірних ланцюжків “каталізатор” моделюється або випадково вибраними зв’язками на ґратці (модель I), або ж випадково вибраними вузлами ґратки (модель II), які розміщені за сценарієм або відпаленого, або замороженого безладу. Для обох типів каталітичних елементів та обох типів безладу розраховується тиск адсорбату та його термодинамічні похідні. Також буде отримано точні фазові діаграми для таких ґраткових газів на псевдоґратках Бете та Фушімі з каталітичними зв’язками, що розміщені випадково за сценарієм відпаленого безладу та взаємодіючими частинками одного й того ж сорту. Основні результати опубліковані в [37, 38].

4.1. Рівноважні властивості двосортних реактивних ґраткових газів на випадкових каталітичних ланцюжках

4.1.1. Моделі каталітично-активованих реакцій $A + B \rightarrow \emptyset$ на ланцюжках з різними структурними елементами

Розглянемо одновимірну ґратку, що містить N адсорбційних вузлів (пізніше ми перейдемо до границі $N \rightarrow \infty$), яка знаходиться у термодинамічній рівновазі

зі змішаною паровою фазою частинок A та B . Частинки обох сортів здійснюють обмін зі своїми відповідними паровими фазами та адсорбуються на порожні вузли ґратки і можуть спонтанно десорбуватися з неї, а за рахунок твердого кору на кожному вузлі ґратки може перебувати не більше однієї частинки (A або B). Парові фази підтримуються при постійних хімічних потенціалах μ_A та μ_B , а відповідні активності визначаються як $z_A = \exp(\beta\mu_A)$ та $z_B = \exp(\beta\mu_B)$, де β – обернена температура, виміряна в одиницях постійної Больцмана k_B .

Далі ми вводимо реакції між адсорбованими частинками A та B . Ми розрізняємо випадки каталітичних зв'язків і каталітичних вузлів.

Модель I. Каталітичні зв'язки

У моделі I ми вибираємо абсолютно випадковим чином деяку частку зв'язків ґратки (тобто сегментів між вузлами) і кажемо, що ці обрані зв'язки мають каталітичні властивості. Ми зображуємо такі каталітичні зв'язки на рисунку 4.1 товстими чорними лініями. Далі ми припускаємо, що частинки A і B , що з'являються одночасно на сусідніх вузлах, які пов'язані каталітичним зв'язком, миттєво реагують, $A + B \rightarrow \emptyset$, і продукт реакції \emptyset покидає систему. Частинки A та B , займаючи одночасно сусідні вузли, які пов'язані некаталітичним зв'язком, можуть співіснувати.

Надалі ми зосередимося на рівноважних властивостях двокомпонентного адсорбату, що утворюється на одновимірній ґратці в ході реакції $A + B \rightarrow \emptyset$ при наявності таких каталітичних зв'язків, з урахуванням випадкового відпаленого та випадкового замороженого безладів у розміщенні каталітичних зв'язків. Статистичну суму моделі I розглянемо далі в розділі 4.1.2, де ми також представляємо точні результати її усереднення за безладом значенні (для випадку відпаленого безладу) і усереднення за безладом логарифма статистичної суми (для випадку замороженого безладу).

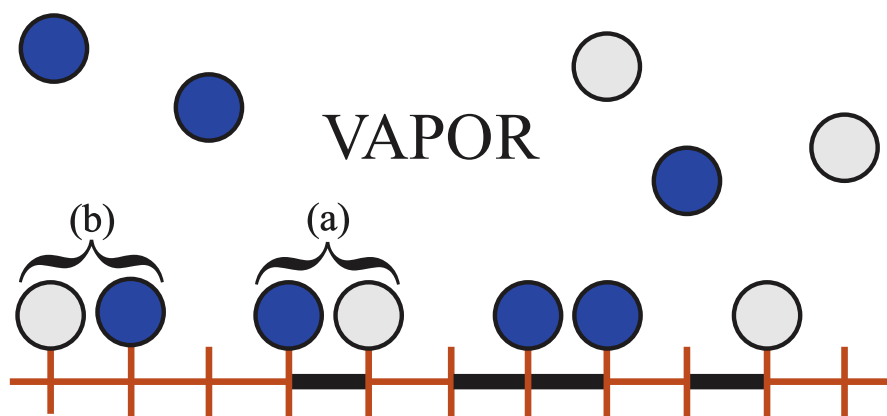


Рис. 4.1. Одновимірна ґратка, яка містить N адсорбційних вузлів, що контактують з паровими фазами частинок A та B (сині та сірі кружечки). Деяка частина зв'язків між сусідніми вузлами має особливі каталітичні властивості (товсті чорні лінії). Частинки A та B здійснюють неперервний обмін зі своїми паровими фазами, які підтримуються при постійних хімічних потенціалах μ_A та μ_B , та адсорбуються на порожні вузли ґратки і десорбуються з неї. Частинки A та B , що з'являються одночасно на сусідніх вузлах, які пов'язані каталітичним зв'язком [випадок (a)], вступають миттєво у реакцію, а продукт реакції залишає систему. Частинки A та B , адсорбовані на сусідні вузли, які пов'язані некаталітичним зв'язком, співіснують [випадок (b)].

Модель II. Каталітичні вузли

В моделі II, ми вибираємо знову ж таки абсолютно випадково деяку частку вузлів ґратки та припускаємо, що ці вибрані вузли мають каталітичні властивості. В цьому випадку, який ми зображуємо на рисунку 4.2, частинки A та B , з'являючись одночасно на сусідніх вузлах ґратки, миттєво вступають у реакцію $A+B \rightarrow \emptyset$, якщо хоча б одна з цих частинок знаходиться на каталітичному вузлі. Як і в моделі I, продукт реакції залишає систему. Пара сусідніх частинок A та B співіснують, якщо вони знаходяться на некаталітичних вузлах.

Як і в моделі I, ми розглядаємо рівноважні властивості двокомпонентного адсорбату, утвореного на одновимірній ґратці неоднорідного каталітичного субстрату, який представлений у вигляді множини каталітичних вузлів. Ми знову розглядаємо випадки відпаленого та замороженого безладів у розташуванні каталітичних вузлів. Статистичну суму моделі II ми представимо в підрозділі 4.1.3, а

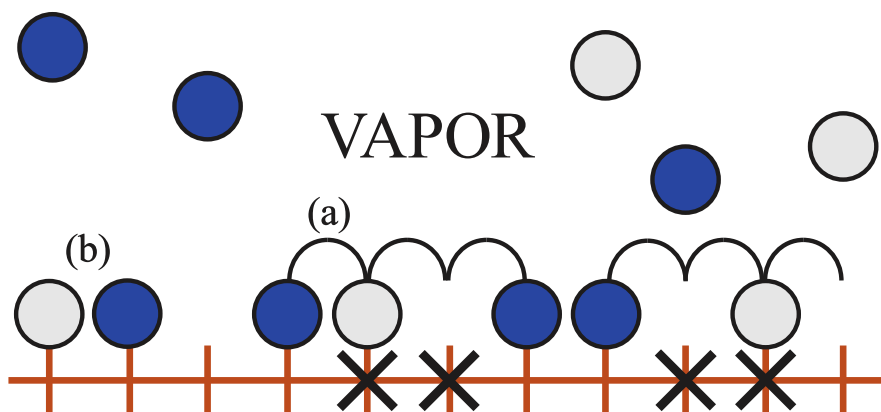


Рис. 4.2. Одновимірна ґратка, яка містить N адсорбційних вузлів, що контактують з паровою фазою. Вузли з каталітичними властивостями позначені товстими хрестиками. Частинки A та B зображені синіми та сірими кружечками. Конфігурація частинок, яка відповідає миттєвій реакції, реалізується у випадку (а), в той час як у випадку (б) сусідні частинки A та B не реагують.

також його усереднене за безладом значення та усереднене за безладом значення його логарифма.

4.1.2. Модель з каталітичними зв'язками (модель I)

Щоб вказати положення каталітичних зв'язків, ми вводимо випадкову булеву змінну ζ_i , так що вона дорівнює 1, якщо зв'язок, що з'єднує вузол i та сусідній вузол $i + 1$ є каталітичним та дорівнює 0, якщо некаталітичний. Якщо кількість каталітичних зв'язків ланцюжка з N вузлами дорівнює N_b , то частка p таких зв'язків дорівнює $p = N_b/N$. Ми припускаємо, що p є скінченною в термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ і, таким чином, представляє середню концентрацію каталітичних зв'язків. Випадкові змінні ζ_i є нескорельовані для різних i і ймовірність $P(\zeta_i)$, що даний зв'язок є каталітичним визначається як

$$P(\zeta_i) = p \delta_{\zeta_i,1} + (1 - p) \delta_{\zeta_i,0}, \quad (4.1)$$

де $\delta_{a,b}$ – δ -символ Кронекера, так що $\delta_{a,a} = 1$ та нуль у іншому випадку. Далі нехай n_i та m_i – дві булеві змінні, що визначають зайнятість вузла. Тоді $n_i = 1$ ($m_i = 1$) якщо вузол i зайнятий частинкою A (B) та нуль, якщо вузол порожній.

У термодинамічній рівновазі і для даної реалізації множини випадкових величин ζ_i велика канонічна статистична сума моделі I, визначена на скінченній ґратці з N адсорбційними вузлами, запишеться наступним чином

$$Z_N^{(I)}[\zeta_i] = \sum_{\{n_i, m_i\}} \prod_i^{N-1} z_A^{n_i} z_B^{m_i} (1 - n_i m_i) (1 - \zeta_i n_i m_{i+1}) (1 - \zeta_i m_i n_{i+1}), \quad (4.2)$$

де сума з нижнім індексом $\{n_i, m_i\}$ пробігає всі можливі значення змінних, що визначають зайнятість вузла. Зауважимо, що множник $(1 - n_i m_i)$ у рівнянні (4.2) виключає конфігурації, в яких частинки A та B одночасно знаходяться на одному й тому ж вузлі.

Модель I. Відпалений безлад

У випадку відпаленого безладу у розміщенні каталітичних зв'язків розрахунки досить тривалі, але порівняно прості. Спочатку ми записуємо усереднену за безладом велику канонічну статистичну суму $\langle Z_N^{(I)}[\zeta_i] \rangle_\zeta$ як

$$\begin{aligned} \langle Z_N^{(I)}[\zeta_i] \rangle_\zeta &= \sum_{\{n_i, m_i\}} \exp\left(\beta\mu_A \sum_i n_i\right) \exp\left(\beta\mu_B \sum_i m_i\right) \\ &\times \prod_i^{N-1} \left\langle (1 - n_i m_i) (1 - \zeta_i n_i m_{i+1}) (1 - \zeta_i m_i n_{i+1}) \right\rangle_{\zeta_i}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

де кутові дужки з нижнім індексом ζ_i позначають усереднення за ансамблем ζ_i . Оскільки ζ_i – незалежні випадкові змінні, а m_i та n_i – булеві змінні, тобто вони приймають тільки значення 0 та 1, усереднення у виразі (4.3) може бути виконано явно:

$$\begin{aligned} Z_N^{(I)} &= \langle Z_N^{(I)}[\zeta_i] \rangle_\zeta = \sum_{\{n_i, m_i\}} \exp\left(\beta\mu_A \sum_i n_i\right) \exp\left(\beta\mu_B \sum_i m_i\right) \\ &\times \prod_i^{N-1} (1 - n_i m_i) \left(1 - p(m_i n_{i+1} + n_i m_{i+1})\right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Наступний крок полягає у виведенні відповідних рекурентних співвідношень, яким підкоряється велика канонічна статистична сума. Тут ми робитимемо подібно як запропоновано у роботі [32]. Визначимо дві допоміжні статистичні суми

$Z_N^{(A)}$ та $Z_N^{(B)}$, які відрізняються від великої канонічної статистичної суми тим, що підкоряються деяким додатковим обмеженням. Функція $Z_N^{(A)}$ обмежується умовою, що вузол $i = N$ зайнятий частинкою A (тобто $n_N = 1$ та $m_N = 0$), у той час як $Z_N^{(B)}$ – умовою, що вузол зайнятий частинкою B (тобто $m_N = 1$ та $n_N = 0$).

Таким чином отримуємо

$$\begin{aligned} Z_N^{(A)} &= Z_N \Big|_{m_N=0}^{n_N=1} \\ &= z_A \sum_{\{n_i, m_i\}} z_A^{\sum_{i=1}^{N-1} n_i} z_B^{\sum_{i=1}^{N-1} m_i} \prod_i^{N-2} [1 - p (m_i n_{i+1} + n_i m_{i+1})] (1 - p m_{N-1}), \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} Z_N^{(B)} &= Z_N \Big|_{n_N=0}^{m_N=1} \\ &= z_B \sum_{\{n_i, m_i\}} z_A^{\sum_{i=1}^{N-1} n_i} z_B^{\sum_{i=1}^{N-1} m_i} \prod_i^{N-2} [1 - p (m_i n_{i+1} + n_i m_{i+1})] (1 - p n_{N-1}). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Тоді для $N \geq 2$ ми маємо, що

$$Z_N^{(I)} = Z_{N-1}^{(I)} + Z_N^{(A)} + Z_N^{(B)}. \quad (4.7)$$

Далі, переглядаючи можливі значення змінних n_{N-1} та m_{N-1} , ми знаходимо, що для $N \geq 3$ функції $Z_N^{(A)}$ та $Z_N^{(B)}$ можна виразити через Z_{N-2} , $Z_{N-1}^{(A)}$ та $Z_{N-1}^{(B)}$ як

$$Z_N^{(A)} = z_A Z_{N-2} + z_A (1 - p) Z_{N-1}^{(B)} + z_A Z_{N-1}^{(A)}. \quad (4.8)$$

Аналогічний вираз для $Z_N^{(B)}$ отримується з (4.8) просто помінявши нижні і верхні індекси 'A' \leftrightarrow 'B', що дає

$$Z_N^{(B)} = z_B Z_{N-2} + z_B (1 - p) Z_{N-1}^{(A)} + z_B Z_{N-1}^{(B)}. \quad (4.9)$$

Рівняння (4.7), (4.8) та (4.9) задовільняють наступним початковим умовам:

$$Z_1 = 1 + z_A + z_B,$$

$$Z_1^{(A)} = z_A, \quad Z_2^{(A)} = z_A (1 + z_A + z_B (1 - p)),$$

$$Z_1^{(B)} = z_B, \quad Z_2^{(B)} = z_B (1 + z_B + z_A(1 - p)). \quad (4.10)$$

Розв'язки рекурентних співвідношень (4.7), (4.8) та (4.9) з початковими умовами, заданими у (4.10), можна знайти за допомогою стандартної техніки твірних функцій (див. наприклад [32]). Ми знаходимо, що твірна функція $Z_t = \sum_{N=1}^{\infty} Z_N t^N$ отримується у вигляді

$$Z_t = \frac{t\mathcal{L}_1(t)}{\mathcal{L}_2(t)}, \quad (4.11)$$

де

$$\mathcal{L}_1(t) = \frac{1 + z_A + z_B}{z_A z_B} - 2t + 2(1 - p)t - t^2 + p(1 - p)t^2,$$

$$\mathcal{L}_2(t) = \frac{1}{z_A z_B} - \frac{1 + z_A + z_B}{z_A z_B} t + t^2 - (1 - p)^2 t^2 + t^3 - (1 - p^2) t^3. \quad (4.12)$$

Позначаючи корені кубічного полінома $\mathcal{L}_2(t)$ як t_1 , t_2 і t_3 , такі що $\mathcal{L}_2(t) = (t - t_1)(t - t_2)(t - t_3)$, ми виражаємо рівняння (4.11) в термінах елементарних дробів та розкладаємо кожен множник в ряд Тейлора за t/t_j , $j = 1, 2, 3$. В результаті, ми знаходимо, що рівняння (4.11) можна переписати як

$$Z_t = \sum_{N=1}^{\infty} \left[\alpha_1 \left(\frac{t}{t_1} \right)^N + \alpha_2 \left(\frac{t}{t_2} \right)^N + \alpha_3 \left(\frac{t}{t_3} \right)^N \right], \quad (4.13)$$

де

$$\alpha_1 = \frac{t_2 t_3 + p [p - (1 - p) t_1] t_1}{(t_1 - t_2)(t_1 - t_3)}, \quad \alpha_2 = \frac{t_1 t_3 + p [p - (1 - p) t_2] t_1}{(t_2 - t_1)(t_2 - t_3)},$$

$$\alpha_3 = \frac{t_1 t_2 + p [p - (1 - p) t_3] t_3}{(t_3 - t_1)(t_3 - t_2)}. \quad (4.14)$$

Порівнюючи рівняння (4.13) з наведеним вище означенням твірної функції, ми робимо висновок, що велика канонічна статистична сума ланцюжка з N адсорбційними вузлами задається точно у вигляді

$$Z_N^{(I)} = \frac{\alpha_1}{t_1^N} + \frac{\alpha_2}{t_2^N} + \frac{\alpha_3}{t_3^N}. \quad (4.15)$$

Як видно з (4.15), поведінка великої канонічної статистичної суми повністю визначається коренями t_1 , t_2 та t_3 . Останні зручно записати як [247]

$$t_{1,3} = \pm 2\sqrt{r_1} \cos \left(\pm \frac{\pi}{6} + \frac{1}{3} \arcsin(X_1) \right) - \frac{2-p}{3p}, \quad (4.16)$$

$$t_2 = 2\sqrt{r_1} \sin \left(\frac{1}{3} \arcsin(X_1) \right) - \frac{2-p}{3p}, \quad (4.17)$$

де ми використали скорочення

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{3(1+z_A+z_B) + (2-p)^2 z_A z_B}{9 p^2 z_A z_B}, \\ q_1 &= \frac{2(2-p)^3 z_A z_B + 27p + 9(2-p)[1+z_A+z_B]}{54 p^3 z_A z_B}, \\ X_1 &= \frac{q_1}{r_1^{3/2}}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Відзначимо, що для всіх $z_{A,B} > 0$, різниця $q_1^2 - r_1^3 < 0$ та $0 < X_1 < 1$, звідки випливає, що всі три корені кубічного поліному $\mathcal{L}_2(t)$ є дійсними. Причому корені впорядковані $t_1 > t_2 > t_3$ та $|t_3| > t_1$ та задовольняють наступним умовам:

$$t_1 t_2 t_3 = -\frac{1}{p^2 z_A z_B} < 0, \quad t_1 t_2 + t_1 t_3 + t_2 t_3 = -\frac{1+z_A+z_B}{p^2 z_A z_B} < 0. \quad (4.19)$$

В термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$, усереднена за безладом велика канонічна статистична сума керується найменшим додатнім коренем (у нашому випадку це t_2) і звідси слідує, що

$$Z_N^{(I)} = \exp \left(-N \left[2\sqrt{r_1} \sin \left(\frac{1}{3} \arcsin \left(\frac{q_1}{r_1^{3/2}} \right) \right) - \frac{2-p}{3p} \right] \right). \quad (4.20)$$

Навіть в цьому простому випадку велика статистична сума $Z_N^{(I)}$ є досить нетривіальною.

Усереднений за безладом тиск отримується з (4.20):

$$P^{(ann)} = \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle Z_N^{(I)}[\zeta_i] \rangle_\zeta = -\frac{1}{\beta} \ln \left[2\sqrt{r} \sin \left(\frac{1}{3} \arcsin(X) \right) - \frac{2-p}{3p} \right]. \quad (4.21)$$

Для $p = 1$, цей вираз зводиться до результату, отриманого для повністю каталітичного ланцюжка у роботі [32].

Вираз для середньої густини $n_A^{(ann)} = \frac{\partial P_I}{\partial \mu_A}$ та стисливості

$$\kappa_A^{(I)} = \frac{1}{\left(n_A^{(k)}\right)^2} \frac{\partial n_A}{\partial \mu_A}, \quad (4.22)$$

отримується явно із (4.21) взяттям похідної. Вони є досить громіздкими, тому в Додатку A.1 ми розглядаємо їх асимптотичну поведінку при малих значеннях активності z_A та z_B .

Симетричний випадок $z_A = z_B = z$

У симетричному випадку $z_A = z_B = z$ вирази для густини значно спрощуються. У цьому випадку $\mathcal{L}_2(t)$ в рівнянні (4.12) факторизується як добуток лінійного та квадратного рівнянь

$$\mathcal{L}_2(t) = (1 - p z t)(1 - (1 + z(2 - p))t - p z t^2). \quad (4.23)$$

Можна помітити, що найменший корінь, який визначає провідну поведінку великої канонічної статистичної суми у границі $N \rightarrow \infty$, є найменшим коренем квадратного рівняння (4.23):

$$t_{\pm} = \pm \frac{1}{2p z} \sqrt{(1 + (2 - p)z)^2 + 4p z} - \frac{1 + (2 - p)z}{2p z}, \quad (4.24)$$

тобто t_+ . Отже, усереднений за безладом тиск у симетричному випадку в термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ визначається виразом

$$\beta P^{(ann)} = -\ln \left(\frac{1}{2p z} \sqrt{(1 + (2 - p)z)^2 + 4p z} - \frac{1 + (2 - p)z}{2p z} \right). \quad (4.25)$$

У симетричному випадку середні густини фаз A та B , а також їх стисливості, очевидно, рівні між собою. У границі невеликої концентрації каталітичних зв'язків, $p \ll 1$, середня густина фаз A та B визначається виразом

$$n^{(ann)}(p) = \frac{2z}{1 + 2z} - \frac{4z^2}{(1 + 2z)^3} p + \mathcal{O}(p^2), \quad (4.26)$$

а в границі, коли система майже повністю каталітична, тобто $p \sim 1$, матимемо

$$n^{(ann)}(p) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1-z}{\sqrt{1+z(6+z)}} \right) + \frac{4z^2}{(1+z(6+z))^{3/2}} (1-p) + \mathcal{O}((1-p)^2). \quad (4.27)$$

Зауважимо, що в границі $z \rightarrow \infty$, як для малих, так і для великих p , $n^{(ann)}(p) \rightarrow 1$ – система повністю покривається частинками. Як показано в роботі [32], де розглядався тільки випадок $p \equiv 1$, це відбувається тому, що система мимовільно розпадається на кластери, що містять тільки один сорт частинок. Ми не можемо виявити аналогічну поведінку у нашому випадку з $p < 1$; для цього потрібний набагато складніший підхід. Відзначимо також, що головний доданок у (4.27) збігається з результатом, отриманим у роботі [32].

Модель I. Заморожений безлад

У випадку замороженого безладу у розподілі каталітичних зв'язків ми використовуємо два додаткових підходи, щоб обчислити усереднений за безладом логарифм статистичної суми у рівнянні (4.2) точно. У першому підході ми розбиваємо підкладку на множину повністю каталітичних кластерів, які не перетинаються, як це було зроблено у роботі [31] для більш простої односортої реакції $A + A \rightarrow \emptyset$. У цьому випадку повністю каталітичний кластер складається з послідовно розміщених каталітичних відрізків заданої довжини, що не перериваються ніякими некаталітичними зв'язками і мають два некаталітичні зв'язки на кінцях. Ми використовуємо комбінаторні аргументи для обчислення статистичних ваг таких кластерів.

Спочатку розглянемо комбінаторний підхід, в якому множина каталітичних зв'язків розбивається на набір повністю каталітичних кластерів, що не перетинаються. У випадку замороженого безладу, коли положення каталітичних зв'язків фіксовані (на відміну від задачі з відпаленим безладом), тут необхідно виконати усереднення логарифма великої канонічної статистичної суми з розподілом $P(\zeta_i)$, де випадкова заморожена змінна ζ_i така, що

$$\zeta_i = \begin{cases} 0, & \text{якщо } i \in \{X_n\}, \\ 1, & \text{у іншому випадку,} \end{cases}$$

де $\{X_n\}$, $n = 1, 2, \dots, N_{nc}$ положення некаталітичних зв'язків. Логарифм великої канонічної статистичної суми, усереднений по всім реалізаціям ансамблю $\{\zeta_i\}$, можна переписати як

$$\langle \ln Z_N^{(I)}[\zeta] \rangle_\zeta = \sum_{N_{nc}=0}^{N-1} p^{N-N_{nc}-1} (1-p)^{N_{nc}} \sum_{\{X_n\}} \ln Z_N(\{X_n\}), \quad (4.28)$$

де сума з нижнім індексом $\{X_n\}$ означає, що підсумовування поширюється на всі можливі розміщення некаталітичних зв'язків N_{nc} .

Далі ми вводимо набір $N_{nc} + 1$ інтервалів $\{l_n\}$, які визначають послідовні каталітичні зв'язки, так що $l_n = X_n - X_{n-1}$ (з $X_0 = 0$) та $l_{N_{nc}+1} = N - X_{N_{nc}}$. Це означає, що перший інтервал включає всі вузли, пов'язані каталітичними зв'язками, починаючи від граничного вузла $i = 0$ до найближчого некаталітичного зв'язка, другий інтервал простягається від цього некаталітичного зв'язка до наступного і т. д., а замикаючий інтервал $l_{N_{nc}+1}$ йде від останнього некаталітичного зв'язка всередині ланцюжка до граничного вузла $i = N$. Таким чином, велика канонічна статистична сума може бути переписана цією “мовою” інтервалів наступним чином:

$$\langle \ln Z_N^{(I)}[\zeta] \rangle_\zeta = \sum_{N_{nc}=0}^{N-1} p^{N-N_{nc}-1} (1-p)^{N_{nc}} \sum_{\{l_n\}} \ln Z_N(\{l_n\}), \quad (4.29)$$

де сума з нижнім індексом $\{l_n\}$ позначає тепер підсумовування за усіма можливими розв'язками рівняння

$$l_1 + l_2 + l_3 + \dots + l_{N_{nc}+1} = N, \quad (4.30)$$

де кожен $l_i \geq 1$.

Потім ми представляємо велику канонічну статистичну суму всього ланцюжка у вигляді суми за статистичними сумами менших кластерів, які містять свої власні набори інтервалів:

$$\langle \ln Z_N^{(I)}[\zeta] \rangle_\zeta = \sum_{N_{nc}=0}^{N-1} p^{N-N_{nc}-1} (1-p)^{N_{nc}} \sum_{K=1}^N N_K(N_{nc}|N) \ln Z_K, \quad (4.31)$$

де $N_K(N_{nc}|N)$ визначає загальну кількість повністю каталітичних кластерів, що містять K вузлів у всіх реалізаціях з фіксованою кількістю некаталітичних зв'язків N_{nc} , а саме

$$N_K(N_{nc}|N) = \sum_{\{l_n\}} \mathcal{N}_K(\{l_n\}|N), \quad (4.32)$$

в якому $\mathcal{N}_K(\{l_n\}|N)$ підкоряються закону “збереження”:

$$\mathcal{N}_1(\{l_n\}|N) + 2\mathcal{N}_2(\{l_n\}|N) + 3\mathcal{N}_3(\{l_n\}|N) + \dots + N\mathcal{N}_N(\{l_n\}|N) = N. \quad (4.33)$$

Відповідно усереднений за безладом логарифм великої канонічної статистичної суми з замороженим випадковим розміщенням каталітичних зв'язків має вигляд

$$\langle \ln Z_N^{(I)}[\zeta] \rangle_\zeta = \sum_{K=1}^N \omega_{K,N}(p) \ln Z_K, \quad (4.34)$$

де $\omega_{K,N}(p)$ – статистична вага K -кластерів, яка означена як

$$\omega_{K,N}(p) = \sum_{N_{nc}=0}^{N-1} p^{N-N_{nc}-1} (1-p)^{N_{nc}} N_K(N_{nc}|N). \quad (4.35)$$

Статистичні ваги $\omega_{K,N}(p)$ можна знайти у явному вигляді наступним чином. Розглянемо спочатку випадки ($K = 1$)- та ($K = 2$)-кластерів, а потім узагальнимо отримані результати для довільного K . ($K = 1$)-кластер може з'явитися, коли є одиничний інтервал $l_r = 1$. Тоді кількість $\mathcal{N}_1(\{l_n\}|N)$ ($K = 1$)-кластерів у $\{l_n\}$ -реалізаціях задається у вигляді

$$\mathcal{N}_1(\{l_n\}|N) = \sum_{r=1}^{N_{nc}+1} \delta(l_r, 1), \quad (4.36)$$

де δ -Кронекера означена наступним чином

$$\delta(k, m) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} \frac{d\tau}{\tau^{1+k-m}} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } k = m, \\ 0, & \text{у іншому випадку.} \end{cases}$$

Таким чином, загальна кількість $N_1(N_{nc}|N)$ ($K = 1$)-кластерів у всіх реалізаціях отримується як

$$N_1(N_{nc}|N) = \sum_{r=1}^{N_{nc}+1} \sum_{\{l_n\}} \delta(l_r, 1) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{r=1}^{N_{nc}+1} \sum_{\{l_n\}} \oint_{\mathcal{C}} \frac{d\tau}{\tau} \frac{1}{\tau^{l_r-1}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{N_{nc} + 1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} \frac{d\tau}{\tau} \tau^{(\sum_{r=1}^{N_{nc}} l_r - (N-1))} \\
&= \frac{N_{nc} + 1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} \frac{d\tau}{\tau} \left(\frac{\tau}{1-\tau} \right)^{N_{nc}} \tau^{-(N-1)}. \tag{4.37}
\end{aligned}$$

Використовуюючи розклад

$$\left(\frac{1}{1-\tau} \right)^{N_{nc}} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{n+N_{nc}-1}{N_{nc}-1} \tau^n = \sum_{n=N_{nc}-1}^{\infty} \binom{n}{N_{nc}-1} \tau^{n-(N_{nc}-1)}, \tag{4.38}$$

ми отримаємо наступний результат:

$$N_1(N_{nc}|N) = (N_{nc} + 1) \binom{N-2}{N_{nc}-1} \times \begin{cases} 1, & \text{якщо } 1 \leq N_{nc} \leq N-1, \\ 0, & \text{у іншому випадку.} \end{cases}$$

Тоді статистична вага $\omega_{1,N}(p)$ ($K=1$)-кластерів задається наступним виразом

$$\begin{aligned}
\omega_{1,N}(p) &= \sum_{N_{nc}=1}^{N-1} p^{N-N_{nc}-1} (1-p)^{N_{nc}} (N_{nc} + 1) \binom{N-2}{N_{nc}-1} \\
&= (1-p)[(1-p)(N-1) + p + 1]. \tag{4.39}
\end{aligned}$$

Подібним чином ми знаходимо, що статистична вага $\omega_{2,N}(p)$ ($K=2$)-кластерів має вигляд

$$\begin{aligned}
\omega_{2,N}(p) &= \sum_{N_{nc}=1}^{N-2} p^{N-N_{nc}-1} (1-p)^{N_{nc}} (N_{nc} + 1) \binom{N-3}{N_{nc}-1} \\
&= (1-p)p[(1-p)(N-2) + p + 1]. \tag{4.40}
\end{aligned}$$

Використовуючи по суті ті ж комбінаторні аргументи, ми в кінцевому результаті знаходимо, що статистична вага $\omega_{K,N}(p)$ кластерів із $K-1$ зв'язками задається наступним виразом

$$\omega_{K,N}(p) = (1-p)p^{K-1} [(1-p)(N-K) + p + 1]. \tag{4.41}$$

Отже, вираз для усередненого за безладом логарифма великої канонічної статистичної суми має вигляд

$$\left\langle \ln Z_N^{(I)}[\zeta_i] \right\rangle_{\zeta} = \frac{1-p}{p} \sum_{K=1}^N p^K \left((1-p)(N-K) + p + 1 \right) \ln Z_K, \tag{4.42}$$

де Z_K – велика канонічна статистична сума повністю каталітичного ланцюжка, що містить K зв'язків. Явний вигляд Z_K був отриманий раніше у роботі [32] і має наступний вигляд

$$Z_K = \frac{t_2 t_3 + t_1}{(t_1 - t_2)(t_1 - t_3)} \frac{1}{t_1^K} + \frac{t_1 t_3 + t_2}{(t_2 - t_1)(t_2 - t_3)} \frac{1}{t_2^K} + \frac{t_1 t_2 + t_3}{(t_3 - t_1)(t_3 - t_2)} \frac{1}{t_3^K}, \quad (4.43)$$

де

$$\begin{aligned} t_1 &= 2\sqrt{r_1} \cos \left(\frac{\pi}{6} + \frac{1}{3} \arcsin \left(\frac{q_1}{r_1^{3/2}} \right) \right) - \frac{1}{3}, \\ t_2 &= 2\sqrt{r_1} \sin \left(\frac{1}{3} \arcsin \left(\frac{q_1}{r_1^{3/2}} \right) \right) - \frac{1}{3}, \\ t_3 &= -2\sqrt{r_1} \cos \left(-\frac{\pi}{6} + \frac{1}{3} \arcsin \left(\frac{q_1}{r_1^{3/2}} \right) \right) - \frac{1}{3}, \end{aligned} \quad (4.44)$$

з r_1 та q_1 , які означені в рівняннях (4.18), покладаючи p рівним 1.

Усереднений за безладом тиск у випадку замороженого безладу отримується з рівняння (4.42) простим диференціюванням:

$$\beta P^{(quen)}(p) = \frac{1}{N} \frac{1-p}{p} \sum_{K=1}^N p^K [(1-p)(N-K) + p + 1] \ln Z_K. \quad (4.45)$$

Симетричний випадок $z_A = z_B = z$

Ми зосередимося тут на симетричному випадку $z_A = z_B = z$. Спочатку ми хотіли б оцінити велику канонічну статистичну сума повністю каталітичного ланцюжка Z_K , що містить K зв'язків. Це можна зробити наступним чином: для розв'язку рекурентних співвідношень (4.7) – (4.9) потрібно знайти розв'язок квадратного рівняння (4.23) для $p = 1$. У цьому випадку твірна функція $Z_t = \sum_{K=1}^{\infty} Z_K t^K$ у рівнянні (4.11) матиме вигляд

$$Z_t = t \frac{1 + z(2+t)}{1 - (1+z)t - zt^2}, \quad (4.46)$$

де корені квадратного рівняння у знаменнику є такими:

$$t_1 = \frac{1}{2z}((1+z) + \sqrt{(1+z)^2 + 4z}), \quad t_2 = \frac{1}{2z}(-(1+z) + \sqrt{(1+z)^2 + 4z}). \quad (4.47)$$

Далі ми перепишемо рівняння (4.46) у термінах елементарних дробів та розкладемо отриманий вираз у ряд Тейлора за степенями t . Порівнюючи отриманий вираз із означенням твірної функції Z_t , робимо висновок, що велика канонічна статистична сума повністю каталітичного ланцюжка із K зв'язками має вигляд

$$Z_K = \frac{1 + 3z + \sqrt{1 + z(6 + z)}}{2\sqrt{1 + z(6 + z)}t_2^K} \mathcal{L}_K, \quad (4.48)$$

де

$$\mathcal{L}_K = 1 - (-1)^K \frac{1 + 3z - \sqrt{1 + z(6 + z)}}{1 + 3z + \sqrt{1 + z(6 + z)}} \left(\frac{t_2}{t_1} \right)^K. \quad (4.49)$$

Зрештою, логарифм великої канонічної статистичної суми (4.48) можна переписати як:

$$\ln Z_K = \ln \mathcal{L}_K + \ln \left(\frac{1 + 3z + \sqrt{1 + z(6 + z)}}{2\sqrt{1 + z(6 + z)}} \right) - K \ln t_2. \quad (4.50)$$

Тепер ми перепишемо рівняння (4.45) для скінченного N у вигляді суми трьох вкладів:

$$\beta P^{(quen)}(p) = \beta P_1^{(quen)}(p) + \beta P_2^{(quen)}(p) + \beta P_3^{(quen)}(p), \quad (4.51)$$

де $P_1^{(quen)}(p)$ – внесок елементарних ($K = 1$)-кластерів, $P_2^{(quen)}(p)$ – внесок N -кластеру (тобто повністю каталітичного кластера, що охоплює весь ланцюжок N зв'язками), і нарешті $P_3^{(quen)}(p)$ є внеском всіх можливих K -кластерів, що залишились. Запишемо у границі $N \rightarrow \infty$ внесок ($K = 1$)-кластерів

$$\beta P_1^{(quen)}(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \omega_{1,N}(p) \ln Z_1 \right) \quad (4.52)$$

і внесок N -кластера:

$$\beta P_2^{(quen)}(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \omega_{N,N}(p) \ln Z_N \right). \quad (4.53)$$

Внесок всіх можливих K -кластерів задається як

$$\beta P_3^{(quen)}(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \sum_{K=2}^{N-1} \omega_{N,K}(p) \ln Z_K \right). \quad (4.54)$$

Беручи до уваги результат для статистичної ваги ($K = 1$)-кластера (4.39), знаходимо, що

$$\beta P_1^{(quen)}(p) = (1 - p)^2 \ln(1 + 2z), \quad (4.55)$$

у той час як внесок N -кластеру для всіх $0 < p \leq 1$ у термодинамічній границі рівний нулеві:

$$\beta P_2^{(quen)}(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} (1 - p^2) p^{N-1} \ln Z_N \right) \equiv 0. \quad (4.56)$$

Давайте перепишемо наступне рівняння (4.54), врахувавши, що логарифм великої канонічної статистичної суми дається виразом (4.50). Тоді матимемо

$$\begin{aligned} \beta P_3^{(quen)}(p) = & \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \ln \left(\frac{1 + 3z + \sqrt{1 + z(6 + z)}}{2\sqrt{1 + z(6 + z)}} \right) \sum_{K=2}^{N-1} \omega_{N,K}(p) - \frac{\ln t_2}{N} \sum_{K=2}^{N-1} K \omega_{N,K}(p) \right. \\ & \left. - \frac{1}{N} \sum_{K=2}^{N-1} \omega_{N,K}(p) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{nK}}{n} \left(\frac{1 + 3z - \sqrt{1 + z(6 + z)}}{1 + 3z + \sqrt{1 + z(6 + z)}} \right)^n \left(\frac{t_2}{t_1} \right)^{nK} \right), \end{aligned} \quad (4.57)$$

де функція \mathcal{L}_K у рівнянні (4.49) розкладається у ряд Тейлора за степенями t_2/t_1 , ($t_2/t_1 < 1$). Після деяких обчислень ми знаходимо, що внесок усіх можливих K -кластерів (за винятком $K = 1$ та $K = N$) рівний

$$\begin{aligned} \beta P_3^{(quen)}(p) = & p(1 - p) \ln \left(\frac{1 + 3z + \sqrt{1 + z(6 + z)}}{2\sqrt{1 + z(6 + z)}} \right) - p(2 - p) \ln \left(\frac{\sqrt{1 + z(6 + z)} - (1 + z)}{2z} \right) \\ & - p(1 - p)^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left(\frac{1 + 3z - \sqrt{1 + z(6 + z)}}{1 + 3z + \sqrt{1 + z(6 + z)}} \right)^n \frac{(t_2/t_1)^{2n}}{1 - p(-1)^n (t_2/t_1)^n}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Тоді з урахуванням вкладів від $\beta P_1^{(quen)}(p)$ (4.55) та $\beta P_3^{(quen)}(p)$ (4.58), ми знаходимо, що усереднений за безладом тиск дається наступним виразом:

$$\begin{aligned} \beta P^{(quen)}(p) = & (1 - p)^2 \ln(1 + 2z) + p(1 - p) \ln \left(\frac{1 + 3z + \sqrt{1 + z(6 + z)}}{2\sqrt{1 + z(6 + z)}} \right) \\ & - p(2 - p) \ln \left(\frac{\sqrt{1 + z(6 + z)} - (1 + z)}{2z} \right) \end{aligned}$$

$$+ p(1-p)^2 \sum_{m=0}^{\infty} p^m \ln \left(1 - (-1)^m \frac{1+3z - \sqrt{1+z(6+z)}}{1+3z + \sqrt{1+z(6+z)}} \left(\frac{t_2}{t_1} \right)^{m+2} \right). \quad (4.59)$$

Нарешті, з виразу для $\beta P^{(quen)}(p)$ (4.59), отримуємо, що усереднена за безладом густина частинок $n^{(quen)}(p)$ у випадку замороженого безладу задається точно виразом

$$\begin{aligned} n^{(quen)}(p) &= \frac{2z(1-p)^2}{1+2z} - 4p z \frac{(1+z)(1-p) + (2p-3)\sqrt{1+z(6+z)}}{(1+z(6+z))(1-z + \sqrt{1+z(6+z)})} \\ &+ p(1-p)^2 z \sum_{m=0}^{\infty} p^m \left(1 - (-1)^m \frac{1+3z - \sqrt{1+z(6+z)}}{1+3z + \sqrt{1+z(6+z)}} \left(\frac{t_2}{t_1} \right)^{m+2} \right)^{-1} \\ &\times \frac{4(-1)^{m+1} (t_2/t_1)^{m+1}}{\sqrt{1+z(6+z)}} \\ &\times \left(\frac{4z(t_2/t_1)}{(1+3z + \sqrt{1+z(6+z)})^2} + \frac{1+3z - \sqrt{1+z(6+z)}}{1+3z + \sqrt{1+z(6+z)}} \frac{(2+m)(1-z)}{(1+z + \sqrt{1+z(6+z)})^2} \right). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Асимптотика усередненої за безладом густини частинок $n^{(quen)}(p)$ (4.60) в границі малої середньої концентрації каталітичних зв'язків, тобто при $p \ll 1$, для довільного z задається як

$$\begin{aligned} n^{(quen)}(p) &= \frac{2z}{1+2z} + \left(\frac{3}{2} + \frac{2}{1+2z} - 2 \frac{1+2z}{1+2z(2+z)} - \frac{1+3z}{1+z(6+z)} \right. \\ &\left. + \frac{5-3z}{2\sqrt{1+z(6+z)}} - \frac{3+4z(3+2z)}{1+2z(1+z)(3+z)} \right) p + \mathcal{O}(p^2), \end{aligned} \quad (4.61)$$

у той час як у протилежній границі майже повністю каталітичного ланцюжка, тобто для $p \sim 1$, матимемо

$$\begin{aligned} n^{(quen)}(p) &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1-z}{\sqrt{1+z(6+z)}} \right) \\ &- \frac{1}{\sqrt{1+z(6+z)}} \left(1 - \frac{1+3z}{\sqrt{1+z(6+z)}} \right) (1-p) + \mathcal{O}((1-p)^2). \end{aligned} \quad (4.62)$$

Відображення моделі I на спін-1 модель

Наприкінці цього підрозділі ми коротко згадаємо про інший підхід до усереднення логарифма великої статистичної суми (для деталей див. Додаток A.1). У нашому другому підході ми відображаємо гамільтоніан моделі I на гамільтоніан спін-1 моделі Блюме-Емері-Гріффітса [193, 258], а потім представляємо, ввівши відповідну трансфер-матрицю $V_{i,i+1}$, усереднений логарифм статистичної суми у рівнянні (4.2) як

$$\left\langle \ln Z_N^{(I)}[\zeta_i] \right\rangle_{\zeta} = \left\langle \ln \left(\text{Tr} \prod_i^N V_{i,i+1} \right) \right\rangle_{\zeta}, \quad (4.63)$$

тобто, як усереднений логарифм сліду добутку взаємно незалежних, симетричних 3×3 випадкових матриць

$$V_{i,i+1} = \begin{pmatrix} z_A & \sqrt{z_A} & (1 - \zeta_i)\sqrt{z_A z_B} \\ \sqrt{z_A} & 1 & \sqrt{z_B} \\ (1 - \zeta_i)\sqrt{z_A z_B} & \sqrt{z_B} & z_B \end{pmatrix}. \quad (4.64)$$

Як показано в Додатку A.1, вираз (4.63) можна розрахувати аналітично у зв'язку з тим, що при $\zeta_i = 0$ відповідна трансфер-матриця має ранг 1.

4.1.3. Модель з каталітичними вузлами (модель II)

Щоб описати каталітичні властивості вузлів ґратки в моделі II, ми призначаємо кожному вузлу випадкову змінну η_i , так що $\eta_i = 1$ якщо i -ий вузол є каталітичним та $\eta_i = 0$, якщо i -ий вузол є некаталітичним. Для зручності обчислень, ми додаємо два додаткові некаталітичні вузли на кінцях ланцюжка з N вузлами, тобто $\eta_0 = 0$ та $\eta_{N+1} = 0$. Далі ми припускаємо, що кількість таких каталітичних вузлів у ланцюжку рівна N_s , так що параметр $p = N_s/N$ можна розглядати як їх середню концентрацію. Випадкові змінні η_i нескорельовані на різних вузлах і ймовірність $P(\eta_i)$ того, що даний вузол є каталітичним, визначається виразом

$$P(\eta_i) = p \delta_{\eta_i,1} + (1 - p) \delta_{\eta_i,0}, \quad (4.65)$$

де $\delta_{a,b}$ – δ -символ Кронекера (див. рівняння (4.1)). Далі нехай булеві змінні n_i та m_i позначають зайнятість вузлів частинками A та B ; $n_i(m_i) = 1$, якщо вузол i зайнятий частинкою A (B), $n_i(m_i) = 0$, якщо немає частинки A (B) на вузлі i . У випадку, якщо одночасно $n_i = 0$ та $m_i = 0$, вузол є вакантним. Тоді для даної реалізації випадкових змінних $\{\eta_i\}$, велика канонічна статистична сума $Z_N^{(II)}[\eta_i]$ моделі II запишеться як

$$Z_N^{(II)}[\eta_i] = \sum_{\{n_i, m_i\}} \prod_i^N z_A^{n_i} z_B^{m_i} \left((1 - n_i m_i) (1 - \eta_i n_i m_{i-1}) (1 - \eta_{i+1} n_i m_{i+1}) \right. \\ \left. \times (1 - \eta_i m_i n_{i-1}) (1 - \eta_{i+1} m_i n_{i+1}) \right). \quad (4.66)$$

Як і в моделі I, множник $(1 - n_i m_i)$ гарантує, що конфігурації, коли обидва $n_i = 1$ та $m_i = 1$, виключені.

Модель II. Відпалений безлад

Велика канонічна статистична сума $\langle Z_N^{(II)}[\eta_i] \rangle_\eta$ моделі II, усереднена безпосередньо за просторовим розподілом вузлів з каталітичними властивості, записується як

$$\langle Z_N^{(II)}[\eta_i] \rangle_\eta = \sum_{\{n_i, m_i\}} \exp \left(\beta \mu_A \sum_i n_i \right) \exp \left(\beta \mu_B \sum_i m_i \right) \prod_i^N (1 - n_i m_i) \\ \times \prod_i^N \left(p (1 - n_i m_{i-1}) (1 - n_i m_{i+1}) (1 - m_i n_{i-1}) (1 - m_i n_{i+1}) + 1 - p \right). \quad (4.67)$$

Для булевих змінних n_i та m_i , які приймають значення 0 та 1, множник у другому рядку можна формально переписати як

$$\left(p (1 - n_i m_{i-1}) (1 - n_i m_{i+1}) (1 - m_i n_{i-1}) (1 - m_i n_{i+1}) + 1 - p \right) \equiv (1 - p)^{\Psi_i},$$

де Ψ_i – булева функція, яка має вигляд

$$\Psi_i = 1 - (1 - n_i m_{i-1}) (1 - n_i m_{i+1}) (1 - m_i n_{i-1}) (1 - m_i n_{i+1}). \quad (4.68)$$

Ця функція може дорівнювати лише 0 або 1, в залежності від значень змінних n_i та m_i . Як наслідок, усереднена за безладом велика канонічна статистична сума

моделі II має вигляд

$$Z_N^{(II)} = \langle Z_N^{(II)}[\eta_i] \rangle_\eta = \sum_{\{n_i, m_i\}} z_A^{\sum_{i=1}^N n_i} z_B^{\sum_{i=1}^N m_i} \left(\prod_i^N (1 - n_i m_i) \right) (1 - p)^{\sum_{i=1}^N \Psi_i}. \quad (4.69)$$

Щоб обчислити $Z_N^{(II)}$ ми використовуємо ту ж стратегію, що і у випадку моделі I, тобто будуємо відповідні рекурентні співвідношення. З цією метою ми вводимо допоміжні великі канонічні статистичні суми, тобто великі канонічні статистичні суми з фіксованим зайнятим останнім вузлом $i = N$. Нехай $Z_N^{(A)}$ відповідає ситуації, коли цей останній вузол зайнятий частинкою A , а $Z_N^{(B)}$ – ситуації, коли цей вузол зайнятий частинкою B . Тоді для $Z_N^{(II)}$ маємо

$$Z_N^{(II)} = Z_N^{(0)} + Z_N^{(A)} + Z_N^{(B)} = Z_{N-1}^{(II)} + Z_N^{(A)} + Z_N^{(B)}, \quad \text{для } N \geq 2. \quad (4.70)$$

Рекурентні співвідношення, яким підкоряються допоміжні статистичні суми, можна продовжити, якщо взяти до уваги, що частинка, яка знаходиться на каталітичному вузлі, може взаємодіяти з обома своїми сусідами. Як наслідок, якщо вузол $i = N$ зайнятий частинкою A (те ж саме для частинки B), то

$$\begin{aligned} Z_N^{(A)} &= Z_N^{(A, 0)} + Z_N^{(A, A)} + Z_N^{(A, B)} \\ &= Z_N^{(A, 0)} + Z_N^{(A, A)} + z_A (1 - p)^2 Z_{N-1}^{(B, 0)} + z_A (1 - p)^2 Z_{N-1}^{(B, B)} + z_A (1 - p) Z_{N-1}^{(B, A)}, \end{aligned}$$

де

$$Z_N^{(A, 0)} = z_A Z_{N-1}, \quad Z_N^{(A, A)} = z_A Z_{N-1}^{(A)},$$

$$Z_N^{(B, 0)} = z_B Z_{N-1}, \quad Z_N^{(B, B)} = z_B Z_{N-1}^{(B)},$$

$$Z_N^{(B, A)} = Z_N^{(B)} - z_B Z_{N-2} - z_B Z_{N-1}^{(B)}.$$

Збираючи та спрощуючи подібні доданки, ми виявляємо, що допоміжні великі канонічні статистичні суми задовільняють для $N \geq 4$ наступним рекурентним співвідношенням:

$$Z_N^{(A)} = z_A Z_{N-2} + z_A Z_{N-1}^{(A)} + z_A (1 - p) Z_{N-1}^{(B)} - z_A z_B p (1 - p) \left(Z_{N-3} + Z_{N-2}^{(B)} \right), \quad (4.71)$$

$$Z_N^{(B)} = z_B Z_{N-2} + z_B Z_{N-1}^{(B)} + z_B(1-p)Z_{N-1}^{(A)} - z_A z_B p(1-p) \left(Z_{N-3} + Z_{N-2}^{(A)} \right), \quad (4.72)$$

які повинні бути доповнені початковими умовами

$$\begin{aligned} Z_1 &= 1 + z_A + z_B, \\ Z_1^{(A)} &= z_A, \quad Z_2^{(A)} = z_A(1 + z_A + z_B(1-p)^2), \\ Z_3^{(A)} &= z_A(1 + z_A + z_B + z_A(1 + z_A + z_B(1-p)^2)) \\ &\quad + z_A z_B(1-p)^2(1 + z_B + z_A(1-p)), \end{aligned} \quad (4.73)$$

та подібні умови для $Z_N^{(B)}$ з $N = 1, 2, 3$.

Щоб розв'язати рекурентні співвідношення (4.70) – (4.72), ми вдаємося до стандартної техніки твірних функцій. При цьому ми знаходимо, що $Z_l = \sum_{N=1}^{\infty} Z_N l^N$ задовільняє

$$Z_l = \frac{l\mathcal{L}_1(l)}{\mathcal{L}_2(l)}, \quad (4.74)$$

де

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1(l) &= \frac{1 + z_A + z_B}{z_A z_B} + p(1-p)(z_A + z_B) - p(2(2-p) + (1-p)p(z_A^2 + z_B^2))l \\ &\quad - p((2-p)(1 + (1-p)(z_A + z_B)) + (1-p)^2 p z_A z_B (z_A + z_B))l^2 \\ &\quad + (1-p)p^2(z_A^2 + z_B^2 + 2(1-p)z_A z_B)l^3 + (1-p)p^2 z_A z_B (1 + z_A + z_B)l^4, \\ \mathcal{L}_2(l) &= \frac{1}{z_A z_B} - \frac{1 + z_A + z_B}{z_A z_B}l + (2-p)pl^2 + p(2-p + (1-p)^2(z_A + z_B))l^3 \\ &\quad - (1-p)^2 p^2 z_A z_B l^4 - (1-p)^2 p^2 z_A z_B l^5. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Зауважимо, що у цьому випадку знаменник є рівнянням п'ятого порядку по l , яке має п'ять коренів l_i , $i = 1, 2, \dots, 5$. Таким чином, вираз (4.74) може бути перетворений як

$$Z_l = \sum_{N=1}^{\infty} \left[\gamma_1 \left(\frac{l}{l_1} \right)^N + \gamma_2 \left(\frac{l}{l_2} \right)^N + \gamma_3 \left(\frac{l}{l_3} \right)^N + \gamma_4 \left(\frac{l}{l_4} \right)^N + \gamma_5 \left(\frac{l}{l_5} \right)^N \right]. \quad (4.76)$$

а велику канонічну статистичну суму можна формально записати як

$$Z_N^{(II)} = \frac{\gamma_1}{l_1^N} + \frac{\gamma_2}{l_2^N} + \frac{\gamma_3}{l_3^N} + \frac{\gamma_4}{l_4^N} + \frac{\gamma_5}{l_5^N}. \quad (4.77)$$

Однак тут коефіцієнти γ_i , $i = 1, \dots, 5$, очевидно, матимуть більш складну структуру в порівнянні з (4.14) і корені l_i можуть бути знайдені аналітично тільки у часткових випадках. Дійсно, тільки деякі класи рівнянь п'ятого порядку можуть бути розв'язані алгебраїчно у термінах радикалів, а в решти випадках справедлива теорема Абеля-Руффіні про нерозв'язуваність в радикалах загального рівняння п'ятого та вищого порядків. Тому доведеться вдатися до чисельного аналізу.

Симетричний випадок $z_A = z_B = z$

Однак, рівняння (4.75) може бути розв'язане аналітично у симетричному випадку $z_A = z_B = z$. У цьому випадку рівняння п'ятого порядку факторизується як добуток квадратного та кубічного рівнянь

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2(l) = & \frac{1}{z^2} \left(1 - pzl - p(1-p)z^2l^2 \right) \left(1 - (1 + (2-p)z)l - pz(1 - (1-p)z)l^2 \right. \\ & \left. + p(1-p)z^2l^3 \right), \end{aligned} \quad (4.78)$$

розв'язки якого можуть бути записані у явному вигляді. Як і в раніше розглянутих випадках, нас цікавить найменший додатній розв'язок рівняння (4.78). Можна показати, що $l_1 > l_4 > l_2 > 0 > l_3 > l_5$, де l_4 та l_5 – розв'язки квадратного рівняння у (4.78), у той час як l_1 , l_2 та l_3 – розв'язки кубічного рівняння. Зауважимо, що $|l_5| > |l_3| > l_2$ і тому l_2 – найменший за абсолютним значенням розв'язок рівняння (4.78).

Введемо наступні позначення:

$$\begin{aligned} r_2 &= \frac{3(1+2z) - p(2+z(11-5p-(1-p)^2z))}{27p(1-p)^2z^2}, \\ q_2 &= \frac{-9+7p+3(1-p)(6-7p)z+3(1-p)^2(6-5p)z^2+2(1-p)^3pz^3}{54(1-p)^3pz^3}, \\ X_2 &= \frac{q_2}{r_2^{3/2}}. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Оскільки $q_2^2 - r_2^3 < 0$ для всіх $z > 0$, усі три корені кубічного рівняння (4.78) є дійсними і їх зручно записати як

$$l_{1,3} = \pm 2\sqrt{r_2} \cos \left(\pm \frac{\pi}{6} + \frac{1}{3} \arcsin(X_2) \right) - \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{(1-p)z} \right),$$

$$l_2 = 2\sqrt{r_2} \sin\left(\frac{1}{3} \arcsin(X_2)\right) - \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{(1-p)z}\right). \quad (4.80)$$

Нарешті, велика канонічна статистична сума, усереднена за відпаленим безладом, у термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ визначається коренем l_2 і задається наступним чином:

$$Z_N^{(II)} = \exp\left(-N \left[2\sqrt{r_2} \sin\left(\frac{1}{3} \arcsin\left(\frac{q_2}{r_2^{3/2}}\right)\right) - \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{(1-p)z}\right)\right]\right). \quad (4.81)$$

Тоді усереднений за безладом тиск у цьому випадку рівний

$$P^{(ann)} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[2\sqrt{r_2} \sin\left(\frac{1}{3} \arcsin(X_2)\right) - \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{(1-p)z}\right)\right]. \quad (4.82)$$

Розглянемо границі $p \ll 1$ та $p \sim 1$, для яких ми знаходимо наступні вирази:

$$n^{(ann)}(p) = \frac{2z}{1+2z} - 2z^2 \frac{4+5z}{(1+2z)^4} p + \mathcal{O}(p^2), \quad (4.83)$$

для $p \ll 1$, у той час

$$n^{(ann)}(p) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1-z}{\sqrt{1+z(6+z)}}\right) + \frac{4z^2}{(1+z(6+z))^{3/2}} (1-p)^2 + \mathcal{O}((1-p)^3) \quad (4.84)$$

в границі $p \sim 1$. Зауважимо, що провідний доданок у (4.84) збігається з провідним доданком у рівнянні (4.27), яке описує поведінку повної густини у випадку відпаленого безладу у моделі I.

Модель II. Заморожений безлад

У випадку замороженого безладу ми сконцентруємося на усередненому за безладом логарифмі великої канонічної статистичної суми. Щоб виконати усереднення точно, ми використовуємо два додаткові підходи. У першому підході ми використовуємо досить складні комбінаторні аргументи, розкладаючи множинну каталітичних вузлів на повністю каталітичні кластери та обчислюючи відповідні статистичні ваги таких кластерів. В цьому випадку повністю каталітичний кластер має більш складну геометрію, ніж у випадку випадкових каталітичних зв'язків, тому що тут реактивні взаємодії включають ефективно три вузли.

Зафіксуємо положення каталітичних вузлів і введемо набір з $N_{nc} + 1$ інтервалів $\{l_n\}$, що з'єднують некаталітичні вузли. Кожен інтервал l_n визначається як $l_n = X_n - X_{n-1}$ (з $X_0 = 0$) та $l_{N_{nc}+1} = N + 1 - X_{N_{nc}}$, де $\{X_n\}$, $n = 1, 2, \dots, N_{nc}$ – позиції некаталітичних вузлів. Логарифм великої канонічної статистичної суми, усереднений за всіма можливими розміщеннями некаталітичних вузлів, запишеться у вигляді

$$\langle \ln Z_N^{(II)}[\eta_i] \rangle_\eta = \sum_{N_{nc}=0}^N p^{N-N_{nc}} (1-p)^{N_{nc}} \sum_{\{l_n\}} \ln Z_N(\{l_n\}), \quad (4.85)$$

де підсумовування повинно бути виконано із врахуванням закону “збереження”

$$l_1 + l_2 + l_3 + \dots + l_{N_{nc}+1} = N + 1, \quad \text{де } l_i \geq 1. \quad (4.86)$$

Далі логарифм великої канонічної статистичної суми всього ланцюжка, що містить N вузлів, природним чином розбивається на суму логарифмів повністю каталітичних K -кластерів.

$$\langle \ln Z_N^{(II)}[\eta_i] \rangle_\eta = \sum_{N_{nc}=0}^N p^{N-N_{nc}} (1-p)^{N_{nc}} \sum_{K=1}^N N_K(N_{nc}|N) \ln Z_K, \quad (4.87)$$

де $N_K(N_{nc}|N)$ – загальна кількість K -кластерів,

$$N_K(N_{nc}|N) = \sum_{\{l_n\}} \mathcal{N}_K(\{l_n\}|N). \quad (4.88)$$

Тоді усереднений за безладом тиск запишеться як

$$\beta P^{(quen)}(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{K=1}^N \omega_{K,N}(p) \ln Z_K, \quad (4.89)$$

де $\omega_{K,N}(p)$ – статистична вага K -кластерів у ланцюжку, що включає N вузлів, яка задається наступним чином

$$\omega_{K,N}(p) = \sum_{N_{nc}=0}^N p^{N-N_{nc}} (1-p)^{N_{nc}} N_K(N_{nc}|N). \quad (4.90)$$

Як показано у роботі [176], у випадку ланцюжка з каталітичними вузлами є два типи інтервалів, які утворюються на цьому ланцюжці і комбінації цих інтервалів утворюють всі можливі кластери:

- кількість K -кластерів, починаючи з будь-якого граничного вузла (“поверхня”):

$$J_{(n)}^{(S)}(\{l_n\}|K|N) = 2 \left(\prod_{i=1}^N \delta(l_i \geq 2) \right) \delta(l_{N+1}, 1) \delta(l_1 + l_2 + \dots + l_n, K); \quad (4.91)$$

- кількість K -кластерів, які повністю знаходяться всередині ланцюжка і не включають граничні вузли (“балк”):

$$J_{(n)}^{(B)}(\{l_n\}|K|N) = \sum_{r=1}^{N_{nc}-n} \delta(l_r, 1) \left(\prod_{i=r+1}^{n+r} \delta(l_i \geq 2) \right) \delta(l_{r+n+1}, 1) \\ \times \delta(l_{r+1} + l_{r+2} + \dots + l_{r+n} + 1, K). \quad (4.92)$$

Таким чином, загальна кількість всіх K -кластерів, що складаються з n інтервалів у даній реалізації випадкового ланцюжка, що містить N_{nc} некаталітичних вузлів, визначається виразом

$$\mathcal{N}_K^{(n)}(\{l_n\}|N) = J_{(n)}^{(S)}(\{l_n\}|K|N) + J_{(n)}^{(B)}(\{l_n\}|K|N), \quad (4.93)$$

де

$$J_{(n)}^{(S)}(\{l_n\}|K|N) = 2 \binom{K-1-n}{n-1} \binom{N-K-1}{N_{nc}-n-1}, \quad (4.94)$$

$$J_{(n)}^{(B)}(\{l_n\}|K|N) = (N_{nc}-n) \binom{K-2-n}{n-1} \binom{N-K-1}{N_{nc}-n-2}. \quad (4.95)$$

Подальше підсумовування $\mathcal{N}_K^{(n)}(\{l_n\}|N)$ за всіма інтервалами $\{l_n\}$ згідно закону “збереження”, а потім підсумовування за всіма можливими кількостями інтервалів n у K -кластері приводить до статистичних ваг K -кластерів:

$$\omega_{K,N}(p) = p^{(K-1)/2} (1-p)^{(K+3)/2} \left(2F_K \left(\sqrt{\frac{p}{1-p}} \right) \right. \\ \left. + (1-p)(N-K-1)F_{K-2} \left(\sqrt{\frac{p}{1-p}} \right) \right), \quad (4.96)$$

у той час як для $K = N$ та $K = 1$ отримаємо

$$\begin{aligned}\omega_{N,N}(p) &= p^{N/2}(1-p)^{N/2} \left(\sqrt{\frac{p}{1-p}} F_N \left(\sqrt{\frac{p}{1-p}} \right) + \right. \\ &\quad \left. + 2F_{N-1} \left(\sqrt{\frac{p}{1-p}} \right) + \sqrt{\frac{p}{1-p}} F_{N-2} \left(\sqrt{\frac{p}{1-p}} \right) \right), \\ \omega_{1,N}(p) &= N(1-p)^3 + 2p(1-p)^2,\end{aligned}\tag{4.97}$$

де $F_n(x)$ – поліноми Фібоначчі

$$F_n(x) = \sum_{l=0}^{\lfloor (n-1)/2 \rfloor} \binom{n-l-1}{l} x^{n-2l-1}.\tag{4.98}$$

Таким чином, знаходимо усереднення логарифма великої суми:

$$\left\langle \ln Z_N^{(II)}[\eta_i] \right\rangle_\eta = \sum_{K=1}^N \omega_{K,N}(p) \ln Z_K,\tag{4.99}$$

де Z_K – велика канонічна статистична сума повністю каталітичного ланцюжка, що містить K вузлів, яка означена в рівнянні (4.43), $\omega_{K,N}(p)$ – статистичні ваги повністю каталітичного кластеру, який утворений K каталітичними вузлами, що з'являється у ланцюжку з N адсорбційними вузлами, які задані у (4.96) та (4.97).

Симетричний випадок $z_A = z_B = z$

Ми зосереджуємося на симетричному випадку $z_A = z_B = z$ і використовуємо раніше отриманий вираз для логарифма великої канонічної статистичної суми (4.50). Після деяких розрахунків, ми знаходимо, що усереднений за безладом тиск для моделі II визначається виразом

$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \left\langle \ln Z_N^{(II)}[\eta_i] \right\rangle_\eta &= \beta P^{(quen)}(p) \\ &= (1-p)^3 \ln(1+2z) + p(1-p)^2 \ln \left(\frac{1+3z+\sqrt{1+z(6+z)}}{2\sqrt{1+z(6+z)}} \right) \\ &\quad - p(p^2-3p+3) \ln \left(\frac{\sqrt{1+z(6+z)}-(1+z)}{2z} \right) - \frac{p(1-p)^4}{\sqrt{p(4-3p)}}\end{aligned}$$

$$\times \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{1}{X_+^m} - \frac{1}{X_-^m} \right) \ln \left(1 - (-1)^{m+1} \frac{1+3z - \sqrt{1+z(6+z)}}{1+3z + \sqrt{1+z(6+z)}} \left(\frac{t_2}{t_1} \right)^{m+3} \right), \quad (4.100)$$

де

$$X_{\pm}^m = \frac{1}{2p(1-p)} (-p \pm \sqrt{p(4-3p)}). \quad (4.101)$$

З рівняння (4.100) можна знайти середню густину частинок, диференціюючи за хімічним потенціалом μ [$z = \exp(\beta\mu)$]:

$$\begin{aligned} n^{(quen)}(p) &= \frac{2z(1-p)^3}{1+2z} - 4pz \frac{(1+z)(1-p(2-p)) - (4-5p+2p^2)\sqrt{1+z(6+z)}}{(1+z(6+z))(1-z+\sqrt{1+z(6+z)})} \\ &\quad - \frac{zp(1-p)^4}{\sqrt{p(4-3p)}} \frac{4(-1)^{m+2}(t_2/t_1)^{m+2}}{\sqrt{1+z(6+z)}} \\ &\quad \times \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{1}{X_+^m} - \frac{1}{X_-^m} \right) \left(1 - (-1)^{m+1} \frac{1+3z - \sqrt{1+z(6+z)}}{1+3z + \sqrt{1+z(6+z)}} \left(\frac{t_2}{t_1} \right)^{m+3} \right)^{-1} \\ &\quad \times \left(\frac{4z(t_2/t_1)}{(1+3z+\sqrt{1+z(6+z)})^2} \frac{1+3z-\sqrt{1+z(6+z)}}{1+3z+\sqrt{1+z(6+z)}} \frac{(3+m)(1-z)}{(1+z+\sqrt{1+z(6+z)})^2} \right). \end{aligned} \quad (4.102)$$

Асимптотична поведінка середньої густини частинок $n^{(quen)}(p)$ (4.102) для малих концентрацій каталітичних вузлів $p \ll 1$:

$$n^{(quen)}(p) = \frac{2z}{1+2z} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{6}{1+2z} + \frac{1-z}{\sqrt{1+z(6+z)}} - 8 \frac{1+3z(1+z)(2+z)}{1+2z(4+z)(1+z)^2} \right) p + \mathcal{O}(p^2), \quad (4.103)$$

а у границі $p \sim 1$ матимемо:

$$\begin{aligned} n^{(quen)}(p) &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1-z}{\sqrt{1+z(6+z)}} \right) - \frac{1}{\sqrt{1+z(6+z)}} \left(1 - \frac{1+3z}{\sqrt{1+z(6+z)}} \right) (1-p)^2 \\ &\quad + \mathcal{O}((1-p)^3). \end{aligned} \quad (4.104)$$

Відображення моделі I на спін-1 модель

Наприкінці цього підрозділу ми коротко згадаємо про інший підхід до усереднення логарифма великої статистичної суми (для деталей див. Додаток A.2). У

другому підході ми використовуємо формальний зв'язок між моделлю II (аналогічно тому, як це було зроблено для моделі I) і спін-1 моделі Блюме-Емері-Гріффітса [193, 258] з конкретним вибором параметрів взаємодії. Це дозволяє нам отримати вираз для усередненого за безладом логарифм великої канонічної статистичної суми:

$$\left\langle \ln Z_N^{(II)}[\eta_i] \right\rangle_\eta = \left\langle \ln \text{Tr} \prod_{i=1}^N V_{i-1,i} V_{i,i+1} \right\rangle_\eta, \quad (4.105)$$

де трансфер-матриці $V_{i,j}$ означені як

$$V_{i,j} = \begin{pmatrix} z_A^{1/2} & z_A^{1/4} & \varepsilon_{i,j} (z_A z_B)^{1/4} \\ z_A^{1/4} & 1 & z_B^{1/4} \\ \varepsilon_{i,j} (z_A z_B)^{1/4} & z_B^{1/4} & z_A^{1/2} \end{pmatrix}, \quad (4.106)$$

з $\varepsilon_{i,j} = (1 - \eta_i)(1 - \eta_j)$, а підпис i, j позначає пари найближчих сусідніх вузлів. У такому представленні усереднений за безладом логарифм великої канонічної статистичної суми можна розглядати як показник Ляпунова добутку випадкових 3×3 матриць, які послідовно скорельовані – для будь-якого i добутки $V_{i-1,i} V_{i,i+1}$ містять одну і ту ж випадкову змінну η_i , а отже, вони не розділяються (на відміну від моделі I).

4.1.4. Усереднений за безладом тиск, густина та стисливість двосортного адсорбату

Для моделі I та моделі II, усереднений за безладом тиск у випадку відпаленого безладу визначається як

$$P_k^{(ann)} \equiv P_k^{(ann)}(T, z_A, z_B) = \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \langle Z_N^{(k)}[\alpha_i] \rangle_\alpha, \quad (4.107)$$

де нижні та верхні індекси $k = \{I, II\}$ як і аргументи $\alpha_i = \{\zeta_i, \eta_i\}$ відповідають моделі I та моделі II.

У випадку замороженого безладу усереднений за безладом тиск запишеться як

$$P_k^{(quen)} \equiv P_k^{(quen)}(T, z_A, z_B) = \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \ln Z_N^{(k)}[\alpha_i] \rangle_\alpha. \quad (4.108)$$

Що стосується середньої густини частинок та стисливості фаз A та B у двокомпонентному адсорбаті, відзначимо, що наші результати показують, що тиск є симетричною функцією із заміною z_A на z_B та навпаки. Тому достатньо розглянути термодинамічні властивості тільки одного із сортів. Надалі ми зосередимося на фазі A . Тоді густина $n_A^{(I)}$ (або $n_A^{(II)}$) фази A у двокомпонентному адсорбаті визначається виразом

$$n_A^{(k)} = \frac{\partial P_k}{\partial \mu_A}, \quad (4.109)$$

де μ_A – хімічний потенціал, що відповідає активності z_A . Тут, щоб визначити середню густина у випадку відпаленого безладу, потрібно використовувати вирази (4.20) та (4.81) для великої канонічної статистичної суми, а у випадку замороженого безладу – усереднений за безладом тиск отримується з рівнянь (4.42) та (4.99). У свою чергу, стисливість фази A знаходиться як

$$\kappa_A^{(k)} = \frac{1}{\left(n_A^{(k)}\right)^2} \frac{\partial n_A}{\partial \mu_A}. \quad (4.110)$$

Нижче ми обговоримо поведінку середніх густин та стисливості фази A у двокомпонентному адсорбаті. Тут ми наводимо ці характерні властивості як функції параметрів системи і підкреслюємо деякі важливі особливості, уникаючи складних аналітичних формул.

На рисунку 4.3 зображені усереднена за безладом густина n_A та стисливість κ_A фази A у випадку відпаленого безладу у розміщенні каталітичних зв'язків чи вузлів. На рисунку 4.3 (а) середня густина представлена як функція активності z_A при фіксованому $z_B = 15$ для трьох значень середньої концентрації p каталітичних зв'язків (червоні пунктирні криві) або каталітичних вузлів (сині суцільні криві). Ми помічаємо, що n_A є монотонно зростаючою функцією від z_A , яка дорівнює нулеві при $z_A = 0$ і наближається до 1 при $z_A \rightarrow \infty$, що означає, що друга фаза повністю витіснена в цій границі. У випадку каталітичних зв'язків точна асимптотична поведінка n_A при великих z_A виглядає як:

$$n_A = 1 - \frac{1 + (1 - p)^2 z_B}{z_A} + O\left(\frac{1}{z_A}\right), \quad (4.111)$$

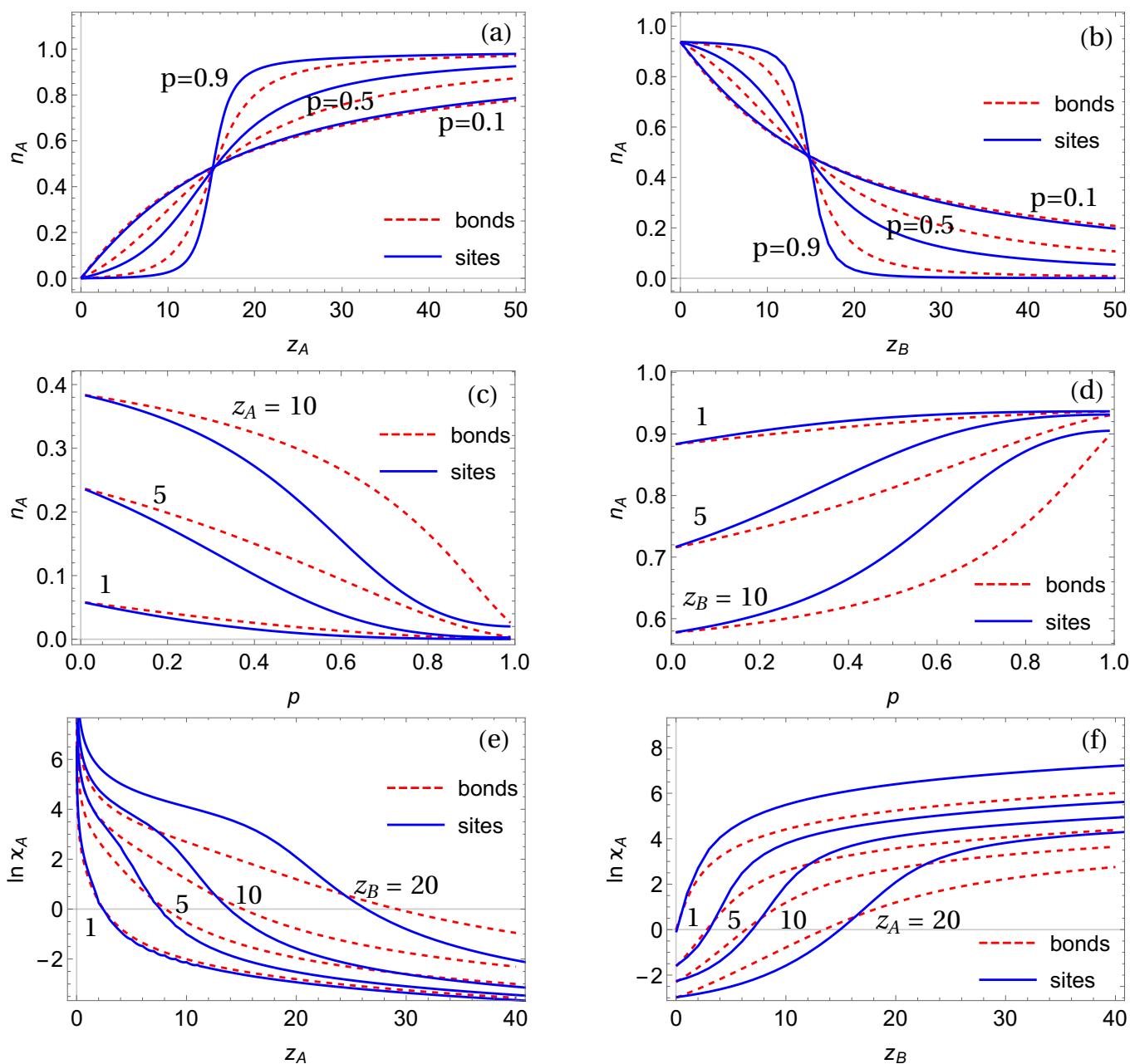


Рис. 4.3. Випадок відпаленого безладу. (а), (б) Середня густина n_A як функція активності z_A для фіксованого $z_B = 15$ (а) та як функція активності z_B для фіксованого $z_A = 15$ (б) для трьох значень середньої концентрації $p = 0.1, 0.5, 0.9$ каталітичних зв'язків (модель I, червоні пунктирні криві) та каталітичних вузлів (модель II, сині суцільні криві). (с), (д) Середня густина n_A як функція середньої концентрації p каталітичних зв'язків чи каталітичних вузлів [той же колірний код, що і у панелей (а) та (б)] для трьох значень z_A та $z_B = 15$ (с) і для трьох значень z_B та $z_A = 15$ (д). (е), (ф) Логарифм стисливості χ_A для середньої концентрації $p = 0.7$ каталітичних зв'язків чи вузлів як функція активності z_A (е) чи z_B (ф). Зліва на право криві відповідають $z_B = 1, 5, 10, 20$ (е) та $z_A = 1, 5, 10, 20$ (ф).

в той час як у випадку каталітичних вузлів n_A має більш складну форму. Насправді сині суцільні криві на рисунку 4.3 – це чисельні графіки громіздких аналітичних виразів, які нам не вдається спростити до компактних форм навіть у асимптотичних границях. Далі ми бачимо, що при найнижчій концентрації p (тут $p = 0.1$) середня густина є досить плавною функцією, яка за формою нагадує залежність густини бінарних ленгмюрівських адсорбатів частинок з твердим ко-ром. Тут видно лише дуже невелику різницю між каталітичними зв'язками та каталітичними вузлами. Ця різниця стає видимою для проміжної концентрації каталітичних зв'язків або вузлів, тобто для $p = 0.5$, коли n_A як функція z_A починає набувати S -подібної форми. Для більших p , (тут $p = 0.9$) ця різниця також досить помітна. В цілому це означає, що точне моделювання каталізатора – або у формі каталітичних зв'язків, або у формі каталітичних вузлів – є актуальною з фізичної точки зору задачею. Також відзначимо, що чим більше p , то все більша зміна n_A зі зміною z_A . Ми бачимо, що для $p = 0.9$, при збільшенні z_A , середня густина n_A не показує значної зміни свого значення до певного порогового z_A^* , коли воно починає круто рости у вузькому інтервалі значень z_A , майже до 1 і далі вже не показує значної зміни. Ця різка зміна поведінки більш виражена у випадку каталітичних вузлів ніж у випадку каталітичних зв'язків. Цікавим є те, що криві для випадків як каталітичних зв'язків, так і каталітичних вузлів при різних значеннях p перетинають один одного майже в одній і тій же точці в околиці $z_A \approx z_B$ для поданого масштабу рисунка.

Далі на рисунку 4.3 (b) ми будемо графік n_A як функцію активності іншого компонента для фіксованого значення його власної активності $z_A = 15$. Ми спостерігаємо тут зворотній сценарій, який показує, як компонента A витісняється іншою компонентою, коли активність останньої збільшується. Для найменшої концентрації каталітичних зв'язків або вузлів n_A спадає дуже плавно і видимої різниці між двома моделями не спостерігається. Ця різниця більш помітна при більш високих значеннях p , а також при різкій зміні n_A зі зміною z_B . Зокрема для $p = 0.9$ ми знов бачимо, що n_A залишається майже постійною (близькою до 1) при поступовому збільшенні z_B до певного порогового значення z_B^* , а потім,

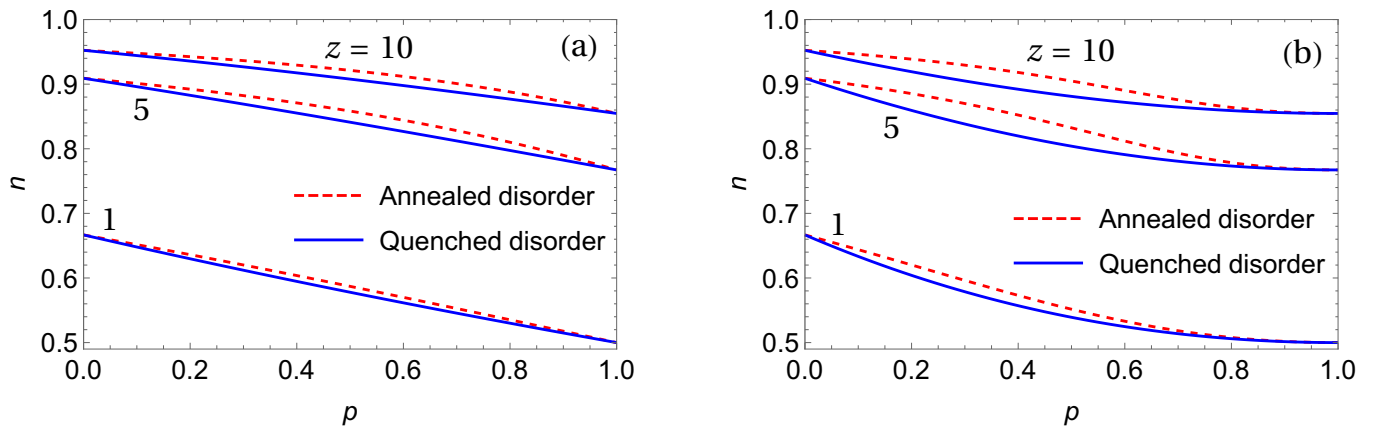


Рис. 4.4. Відпалений безлад проти замороженого. (а) Середня густина n для моделі I як функція середньої концентрації p каталітичних зв'язків для трьох значень активності $z = z_A = z_B$. (б) Середня густина n для моделі II як функція середньої концентрації p каталітичних вузлів для трьох значень активності $z = z_A = z_B$.

коли активність z_B перевищує це значення, n_A різко падає до майже нульового значення, що означає, що фаза A майже повністю зникає при скінченному z_B .

На рисунках 4.3 (с) та 4.3 (д), представлена залежність середньої густини n_A від концентрації каталітичних зв'язків або каталітичних вузлів для декількох значень активності. На рисунку 4.3 (с) ми фіксуємо $z_B = 15$ та будуємо n_A як функцію p для $z_A = 1, 5$ та 10 . На рисунку 4.3 (д), навпаки, ми фіксуємо $z_A = 15$ та будуємо n_A як функцію p для $z_B = 1, 5$ та 10 . Ми бачимо, що n_A є монотонно спадною функцією від p при фіксованому z_B та є монотонно зростаючою функцією від p при фіксованому z_A . Далі ми розуміємо, що поведінка n_A у випадку каталітичних вузлів стає помітно відмінною від такої поведінки у випадку каталітичних зв'язків при проміжних концентраціях і тим виразнішою, чим більше значення активності, незалежно від того, чи стосується це z_A , чи z_B .

На рисунках 4.3 (е) та 4.3 (ф), ми будуємо логарифм стисливості фази A як функцію активності z_A для декількох значень z_B [рисунок 4.3 (е)] та як функцію активності z_B для декількох значень z_A [рисунок 4.3 (ф)]. Ми знаходимо, що в цілому κ_A є монотонно спадною функцією від z_A і монотонно зростаючою функцією від z_B . Різниця між двома моделями невелика для низької активності і стає все більш виразною для більших z . Цікаво, що у випадку каталітичних вузлів κ_A як

функція z_A має виступ, який відсутній у випадку каталітичних зв'язків.

Порівнюємо тепер на рисунку 4.4 поведінку у випадку відпаленого та замороженого безладів моделі I [рисунок 4.4 (а)] та моделі II [рисунок 4.4 (b)], для простоти розглядаючи тільки симетричний випадок рівних активностей $z_A = z_B = z$. Як наслідок, в цьому симетричному випадку усереднені за безладом густини n_A та n_B рівні одна одній, так що ми опускаємо індекс A . Більш того, розглядаючи P_I (чи P_{II}) як функцію z і беручи похідну по $\mu = \ln z/\beta$, ми відразу отримуємо повну густину обох сортів. Повна густина представлена на рисунку 4.4. Ми прийшли до висновку, що у той час як поведінка у випадку відпаленого безладу доволі сильно відрізняється, якщо ми розглядаємо каталізатор як множину каталітичних зв'язків або як множину каталітичних вузлів, ми не бачимо великої різниці між випадками відпаленого та замороженого безладів для кожної моделі. Це досить контр-інтуїтивно, тому що останній випадок складніший з математичної точки зору і отримані в результаті вирази набагато більш громіздкі.

Модель I. Відпалений безлад проти замороженого безладу

На рисунку 4.5 ми наводимо порівняння поведінки термодинамічних властивостей у випадку відпаленого безладу (червоні пунктирні криві) та замороженого безладу (сині суцільні криві). На рисунку 4.5 (а) і 4.5 (b) зображена усереднена за безладом густина n_A як функція середньої концентрації p каталітичних зв'язків для різних значень активності z_A та фіксованому z_B . На рисунку 4.5 (c) і 4.5 (d) ми будуємо логарифм стисливості κ_A як функцію p для трьох значень z_A [і фіксованому $z_B = 15$; рисунок 4.5 (c)] та трьох значень z_B [і фіксованому $z_A = 15$; рисунок 4.5 (d)]. Як ми вже відзначали, поведінка виявляється дуже подібною і тільки помітна різниця проявляється при проміжних p та великих значеннях активності.

Модель II. Відпалений безлад проти замороженого безладу

На рисунку 4.6 ми порівнюємо поведінку термодинамічних властивостей для моделі II із відпаленим безладом (червоні пунктирні криві) та замороженим безла-

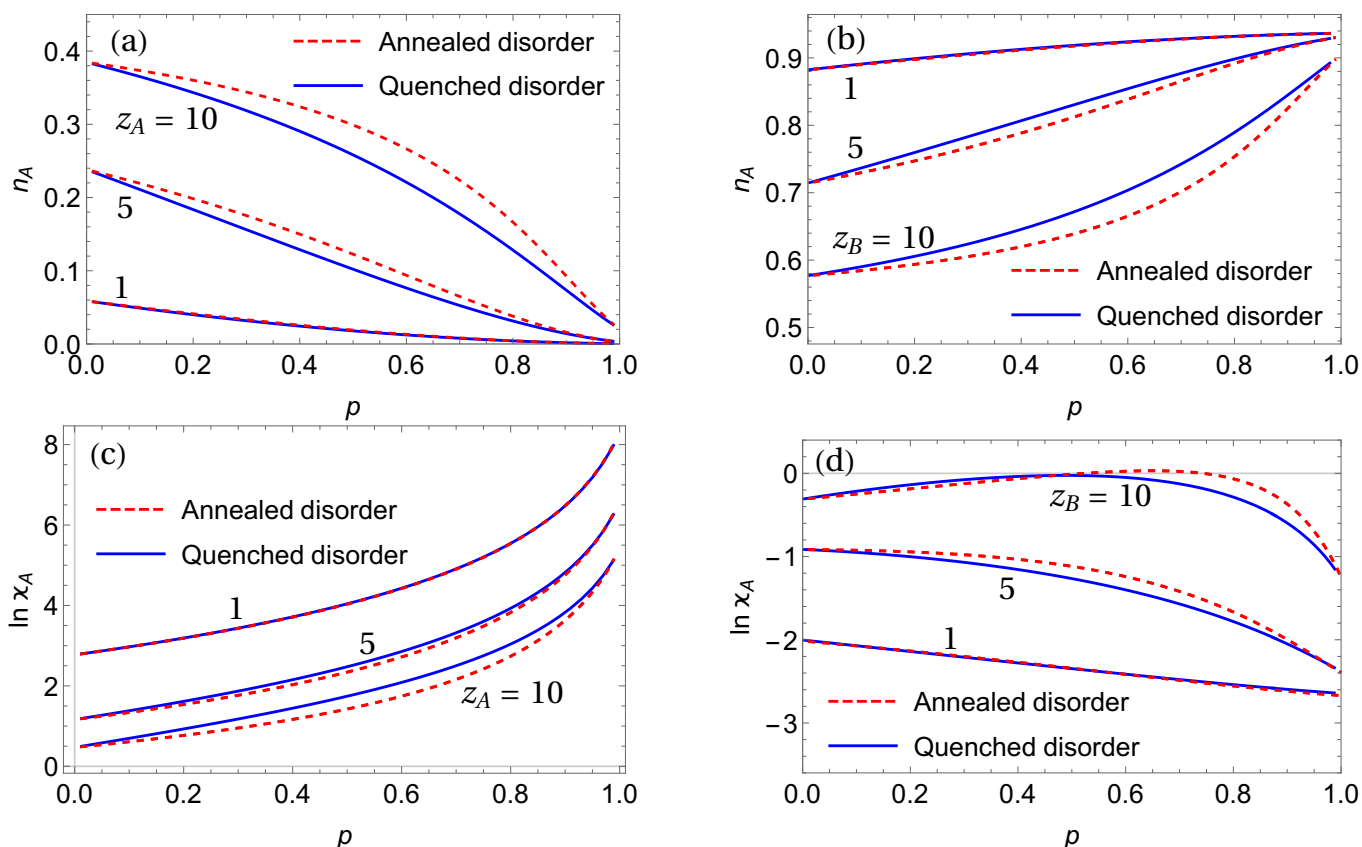


Рис. 4.5. Модель I. Відпалений безлад (червоні пунктирні криві) проти замороженого безладу (сині суцільні криві). (a), (b) Середня густина n_A як функція середньої концентрації ρ каталітичних зв'язків для трьох значень z_A та $z_B = 15$ (a) і трьох значень z_B та $z_A = 15$ (b). (c), (d) Логарифм стисливості χ_A як функція середньої концентрації ρ каталітичних зв'язків для трьох значень z_A та $z_B = 15$ (c) і трьох значень z_B та $z_A = 15$ (d).

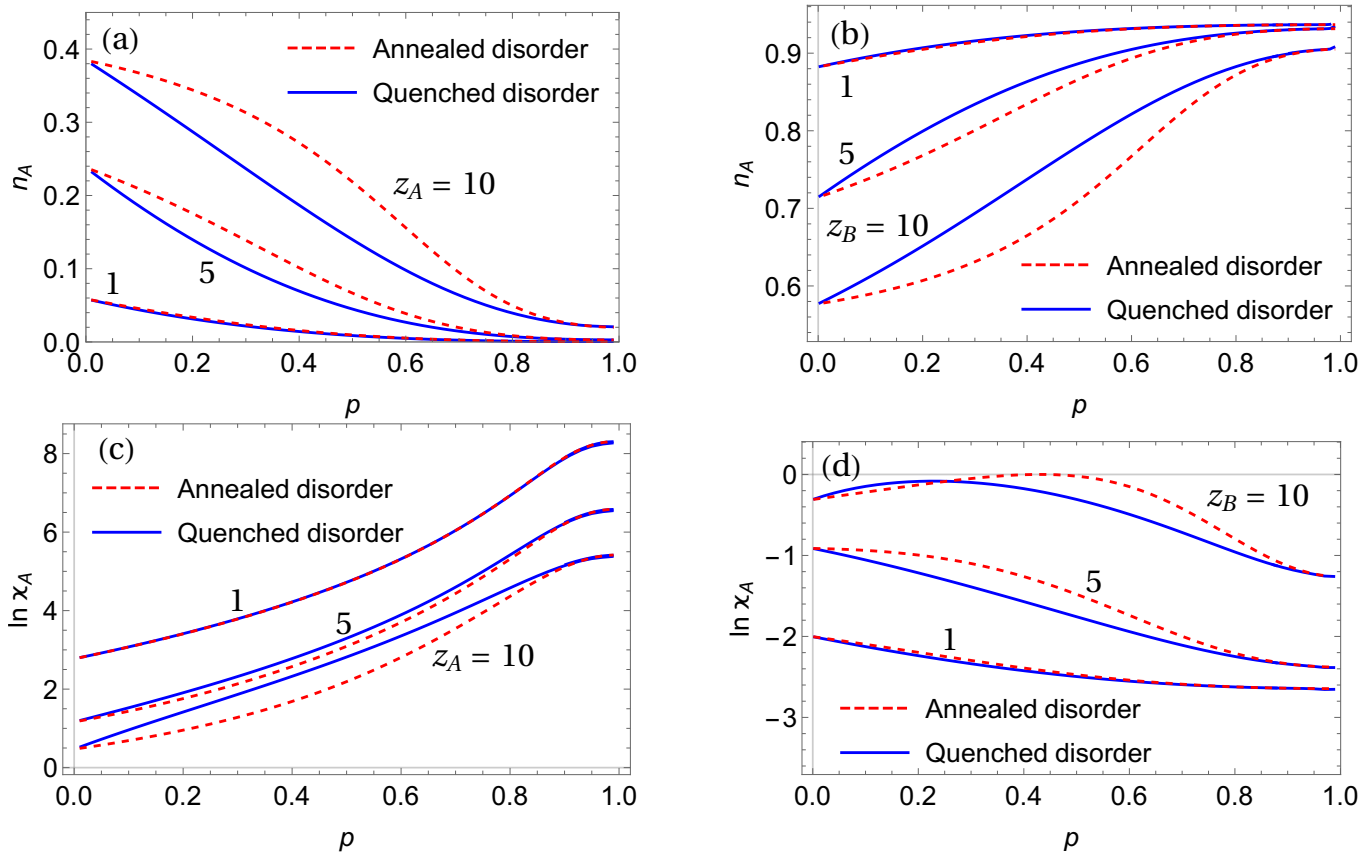


Рис. 4.6. Модель II. Відпалений безлад (червоні пунктирні криві) проти замороженого безладу (сині суцільні криві). (а), (б) Середня густина n_A як функція середньої концентрації ρ каталітичних вузлів для трьох значень z_A та $z_B = 15$ (а) і трьох значень z_B та $z_A = 15$ (б). (с), (д) Логарифм стисливості χ_A як функція середньої концентрації ρ каталітичних вузлів для трьох значень z_A та $z_B = 15$ (с) і трьох значень z_B та $z_A = 15$ (д).

дом (сині суцільні криві). На рисунку 4.6 (а) та 4.6 (б) ми зображуємо усереднену за безладом густина n_A як функцію середньої концентрації ρ каталітичних вузлів для декількох значень z_A та фіксованому $z_B = 15$ [рисунк 4.6 (а)] і для декількох значень z_B та фіксованому $z_A = 15$ [рисунк 4.6 (б)]. На рисунку 4.6 (с) та 4.6 (д) представлений логарифм стисливості χ_A як функція середньої концентрації ρ каталітичних вузлів. Ми бачимо, що якісно поведінка дуже подібна на поведінку моделі I. Однак кількісно в моделі II різниця між випадками відпаленого та замороженого безладів більш виражена, ніж в моделі I, особливо при проміжних концентраціях ρ каталітичних вузлів та високих значень активності.

4.2. Бінарні ґраткові гази частинок з м'яким виключенням: точні фазові діаграми для деревовидних ґраток

4.2.1. Модель ґраткового газу частинок з м'яким виключенням

У цьому підрозділі ми розширяємо модель I (див. підрозділ 4.1.1) та вважаємо, що і частинки одного й того ж сорту, при зустрічі на сусідніх вузлах, взаємодіють одна з одною, а сила такої взаємодії, J_A та J_B , може бути або від'ємною, або додатньою (взаємодія може бути або відштовхувальною, або притягальною). В термодинамічній рівновазі велика канонічна статистична сума на відміну від (4.2) матиме наступний вигляд

$$Z(\{\zeta_{\langle ij \rangle}\}) = \sum_{\{n_i, m_i\}} z_A^{\sum_i n_i} z_B^{\sum_i m_i} e^{\beta J_A \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \beta J_B \sum_{\langle ij \rangle} m_i m_j} \times \prod_{\langle ij \rangle} (1 - \zeta_{\langle ij \rangle} n_i m_j)(1 - \zeta_{\langle ij \rangle} m_i n_j), \quad (4.112)$$

де позначення такі ж як у попередньому підрозділі.

Далі припустимо, що безлад у розміщенні каталітичних зв'язків є відпаленим, а отже велика канонічна статистична сума у рівнянні (4.112) може бути безпосередньо усереднена за випадковою змінною $\zeta_{\langle ij \rangle}$. Оскільки змінна $\zeta_{\langle ij \rangle}$ назначається заданому зв'язку та статистично не залежить від стану інших зв'язків, то таке усереднення є простим і дає наступну форму великій канонічній статистичній сумі

$$Z(p) = \sum_{\{n_i, m_i\}} z_A^{\sum_i n_i} z_B^{\sum_i m_i} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (4.113)$$

де \mathcal{H} – ефективний гамільтоніан досліджуваної моделі:

$$\mathcal{H} = -J_A \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j - J_B \sum_{\langle ij \rangle} m_i m_j - \beta^{-1} \ln(1-p) \sum_{\langle ij \rangle} (m_i n_j + n_i m_j). \quad (4.114)$$

Зауважимо, що при усередненні по каталітичним властивостям зв'язків обмеження строгого виключення замінюється більш м'якою умовою: у випадку відпаленого безладу у розміщенні каталітичних зв'язків частинки різних сортів володіють

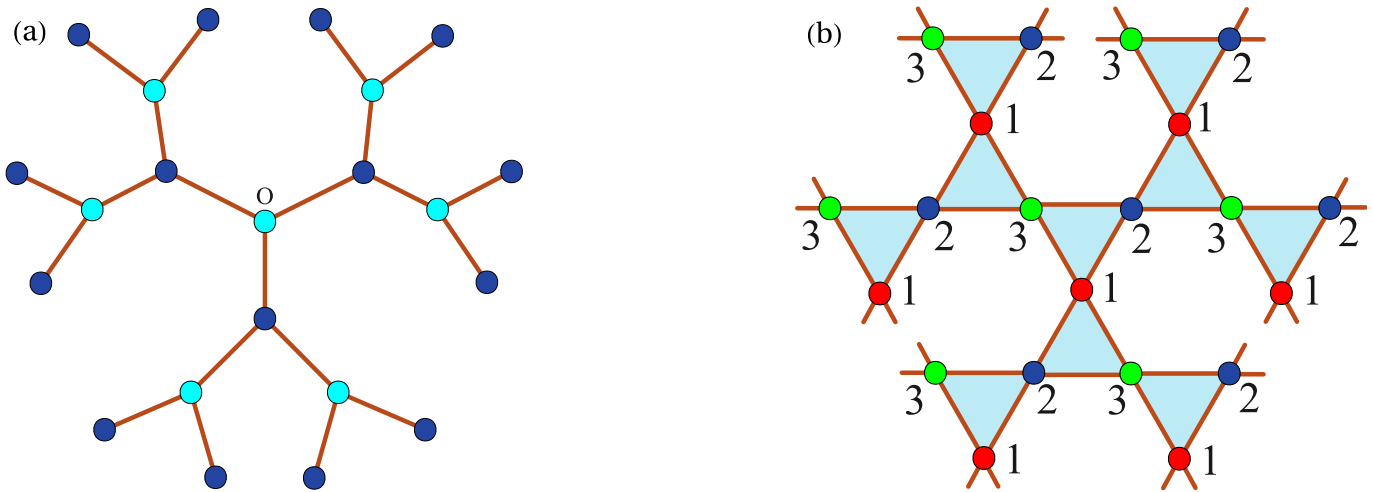


Рис. 4.7. (а) Дерево Кейлі з координаційним числом $q = 3$, що містить $N = 3$ поколінь, що виходять з кореневого вузла O . Таке дерево Кейлі є дво-дольним (bipartite); дві підґратки позначені різними кольорами. (б) Фрагмент ґратки Фушімі, елементарними складовими якої є трикутники, а координаційне число трикутників $t = 2$. Така ґратка є тридольною (tripartite); три різні підґратки позначені як 1, 2 та 3.

короткосяжним взаємним відштовхуванням зі скінченною амплітудою $-\ln(1-p)$, яке стає нескінченно сильним тільки при $p = 1$. Таким чином, при $p < 1$, частинки A та B , в принципі, можуть перебувати одночасно на сусідніх вузлах. Надалі ми зосередимося виключно на симетричному випадку з $\mu_A = \mu_B = \mu$ та $J_A = J_B = J$, так що можна очікувати, що частинки A та B присутні у системі при рівних середніх густинах. З такими параметрами наша система перетворюється у модель типу Блюме-Емері-Ґріффітса [258], відому також як узагальнена модель для опису систем з трикритичною поведінкою [259, 260].

Наш аналіз статистичної суми у рівнянні (4.113) проводиться для двох окремих випадків псевдоґраток – ґратка Бете та ґратка Фушімі (див. рисунок 4.7) [261].

Ґратка Бете знаходиться глибоко всередині (далеко від граничних вузлів) так званого дерева Кейлі з нескінченним числом поколінь [див. рисунок 4.7 (а), як приклад дерева Кейлі з трьома поколіннями]. У свою чергу, ґратка Фушімі [див. рисунок 4.7 (б)], що знаходиться глибоко всередині відповідного дерева Фушімі, в загальному випадку є зв'язаним графом з еквівалентними вершинами, будівель-

ними блоками якого є Q -полігони ($Q \geq 2$). На рисунку 4.7 (b), ми зображуємо ґратку Фушімі, яка використовується у нашому аналізі, такими полігонами є трикутники, тобто $Q = 3$, а координаційне число $t = 2$ – це кількість трикутників, які зустрічаються при кожному вузлі. Таким чином, досліджувана ґратка Фушімі є нескінченно вкладеним набором трикутників зі спільними кутами (corner-sharing), так що локальна геометрія ідентична геометрії ґратки Каґоме. Однак у неї більш слабка геометрична фрустрація, ніж у вихідної ґратки Каґоме, тому що трикутники ніколи не з'єднуються повторно, що призводить до деревовидної структури [193, 261, 262].

4.2.2. Ґратка Бете

Як ми вже зазначали, практично всі відомі класичні моделі статистичної механіки були вивчені на ґратці Бете, так що загальна процедура виведення статистичної суми добре описана [34, 191, 193]. Щоб зробити виведення більш прозорим, ми дозволили активностям частинок A та B бути різними (позначивши їх як z_A та z_B), а також розглядаємо різні амплітуди взаємодій J_A і J_B між парами AA та BB . Це дозволить нам більш чітко виділити різні вклади. Більш того, збереження різної активності дозволить нам оцінити середню густину обох сортів шляхом простого диференціювання вільної енергії від відповідної активності. В остаточних результатах ми повернемося до симетричного випадку.

Перший крок полягає у розгляді трьох можливих подій щодо зайнятості кореневого вузла O . Велику канонічну статистичну суму (4.113) у цьому випадку можна записати для N поколінь дерева Кейлі:

$$Z(p) = Z_N^{(0)}(p) + Z_N^{(A)}(p) + Z_N^{(B)}(p), \quad (4.115)$$

де $Z_N^{(0)}(p)$, $Z_N^{(A)}(p)$, $Z_N^{(B)}(p)$ – великі статистичні суми з вакантним кореневим вузлом, який зайнятий частинкою A чи частинкою B . Тоді дерево Кейлі природним чином розпадається на q незалежних гілок, кожна з яких є кореневим деревом із заданим кореневим вузлом (який або порожній, або зайнятий частинками одного

із сортів). Потім ми вводимо допоміжні функції $C_N(0, p)$, $C_N(A, p)$ та $C_N(B, p)$ через наступні співвідношення:

$$Z_N^{(0)}(p) = C_N^q(0, p), \quad Z_N^{(A)}(p) = z_A^{1-q} C_N^q(A, p), \quad Z_N^{(B)}(p) = z_B^{1-q} C_N^q(B, p). \quad (4.116)$$

Зауважимо, що кожне з кореневих дерев містить $q-1$ ідентичних гілок (які також є кореневими деревами) з N поколіннями. На другому етапі розглядаються всі можливі значення сусідів кореневого вузла. Допоміжні функції у рівнянні (4.116) задовольняють

$$\begin{aligned} C_N(0, p) &= C_{N-1}^{q-1}(0, p) + z_A^{2-q} C_{N-1}^{q-1}(A, p) + z_B^{2-q} C_{N-1}^{q-1}(B, p), \\ C_N(A, p) &= z_A C_{N-1}^{q-1}(0, p) + z_A^{3-q} e^{\beta J_A} C_{N-1}^{q-1}(A, p) \\ &\quad + (1-p) z_A z_B^{2-q} C_{N-1}^{q-1}(B, p), \\ C_N(B, p) &= z_B C_{N-1}^{q-1}(0, p) + (1-p) z_A^{2-q} z_B C_{N-1}^{q-1}(A, p) \\ &\quad + z_B^{3-q} e^{\beta J_B} C_{N-1}^{q-1}(B, p), \end{aligned} \quad (4.117)$$

що дозволяє нам у кінцевому випадку отримати рекурентні співвідношення. Вони спрощуються, коли ми вводимо нові змінні x_N та y_N , які визначаються відношенням допоміжних функцій,

$$x_N = \frac{C_N(A, p)}{z_A C_N(0, p)}, \quad \text{та} \quad y_N = \frac{C_N(B, p)}{z_B C_N(0, p)}. \quad (4.118)$$

У термінах x_N та y_N ми отримуємо систему двох зв'язаних нелінійних рекурентних рівнянь:

$$\begin{aligned} x_N &= \frac{1 + z_A e^{\beta J_A} x_{N-1}^{q-1} + (1-p) z_B y_{N-1}^{q-1}}{1 + z_A x_{N-1}^{q-1} + z_B y_{N-1}^{q-1}}, \\ y_N &= \frac{1 + (1-p) z_A x_{N-1}^{q-1} + z_B e^{\beta J_B} y_{N-1}^{q-1}}{1 + z_A x_{N-1}^{q-1} + z_B y_{N-1}^{q-1}}. \end{aligned} \quad (4.119)$$

У симетричному випадку, коли $J_A = J_B = J$ та $z_A = z_B = z$, рівняння (4.119) зводиться до наступного:

$$x_N = \frac{1 + z e^{\beta J} x_{N-1}^{q-1} + (1-p) z y_{N-1}^{q-1}}{1 + z x_{N-1}^{q-1} + z y_{N-1}^{q-1}},$$

$$y_N = \frac{1 + (1 - p)zx_{N-1}^{q-1} + ze^{\beta J}y_{N-1}^{q-1}}{1 + zx_{N-1}^{q-1} + zy_{N-1}^{q-1}}. \quad (4.120)$$

Звернемося до границі $N \rightarrow \infty$ та розглянемо фрагмент дерева Кейлі, який знаходиться глибоко всередині далеко від граничних вузлів, тобто який утворює так звану ґратку Бете [193]. Всі вузли ґратки Бете є еквівалентними і тому термодинамічні фази описуються нерухомою точкою (або розв'язками типу циклів) $\{x, y\}$ рівняння (4.120), тобто всі $\{x_N, y_N\}$ повинні збігатись до $\{x, y\}$ при $N \rightarrow \infty$. Знайшовши $\{x, y\}$, можна визначити термодинамічні властивості нашої моделі. Зокрема, середні густини частинок двох сортів A та B на будь-якому вузлі ґратки Бете однакові і можуть бути виражені через великі канонічні статистичні суми $C_N(0, p)$, $C_N(A, p)$ та $C_N(B, p)$. В результаті, середні густини різних сортів A та B на центральному вузлі O дерева Кейлі можна виразити у наступній формі

$$\rho_0^{(A)} = \frac{Z_N^{(A)}(p)}{Z_N^{(0)}(p) + Z_N^{(A)}(p) + Z_N^{(B)}(p)}, \quad \rho_0^{(B)} = \frac{Z_N^{(B)}(p)}{Z_N^{(0)}(p) + Z_N^{(A)}(p) + Z_N^{(B)}(p)}. \quad (4.121)$$

Використовуючи (4.116) та (4.118), ми отримаємо вирази у змінних x_N та y_N :

$$\rho_0^{(A)} = \frac{z_A x_N^q}{1 + z_A x_N^q + z_B y_N^q}, \quad \rho_0^{(B)} = \frac{z_B y_N^q}{1 + z_A x_N^q + z_B y_N^q} \quad (4.122)$$

або ж у симетричному випадку:

$$\rho^{(A)} = \frac{zx^q}{1 + zx^q + zy^q}, \quad \rho^{(B)} = \frac{zy^q}{1 + zx^q + zy^q}. \quad (4.123)$$

Зауважимо, що виведення правильного виразу для вільної енергії вимагає деяких додаткових та досить тонких аргументів, тому що вклади, обумовлені граничними вузлами, повинні бути належним чином виключені. Для отримання вільної енергії бінарного ґраткового газу частинок (потрійної суміші частинок та пустот) на ґратці Бете ми слідуємо загальному підходу з [263], який застосовується для довільних рекурсивних ґраток. Підставляючи рівняння (4.116) у вираз (4.115), ми знаходимо, що вільна енергія дерева з N поколіннями задовільняє наступному виразу:

$$-\beta F_N = \ln Z_N = q \ln C_N(0, p) + \ln(1 + z_A x_N^q + z_B y_N^q). \quad (4.124)$$

Скориставшись рекурентним співвідношенням (4.117), ми отримуємо, що

$$-\beta F_N = -(q-1)^n \beta F_{N-n} - \beta F_{Nn}, \quad (4.125)$$

де F_{Nn} позначає вільну енергію моделі на піддереві з n поколіннями ($n \leq N$) всередині дерева Кейлі з N поколіннями. Остання властивість визначається як:

$$\begin{aligned} -\beta F_{Nn} &= q \sum_{K=1}^n (q-1)^{K-1} \ln \left(1 + z_A x_{N-K}^{q-1} + z_B y_{N-K}^{q-1} \right) \\ &\quad - (q-1)^n \ln \left(1 + z_A x_{N-n}^q + z_B y_{N-n}^q \right) + \ln \left(1 + z_A x_N^q + z_B y_N^q \right). \end{aligned} \quad (4.126)$$

Далі, в границі $N \rightarrow \infty$ (такій, що всі $x_{N-K} \equiv x$ та $y_{N-K} \equiv y$) результуючий вираз для F_n матиме вигляд:

$$\begin{aligned} -\beta F_n &= q \frac{(q-1)^n - 1}{q-2} \ln(1 + z_A x^{q-1} + z_B y^{q-1}) \\ &\quad - ((q-1)^n - 1) \ln(1 + z_A x^q + z_B y^q). \end{aligned} \quad (4.127)$$

Наступний крок полягає у переході до границі так званої ґратки Бете – частина дерева Кейлі, що знаходиться глибоко всередині, далеко від граничних вузлів. Усередині цієї внутрішньої частини, що є деревом Кейлі з n поколіннями, усі вузли вважаються еквівалентними. Згідно з [193] (див. також [264] та [263]), кількість таких вузлів N_s^B пов'язані з кількістю зв'язків N_b^B , у припущенні однорідності, як $N_b^B / N_s^B = q/2$. Для дерева Кейлі з n поколіннями $N_b^B = q((q-1)^n - 1)/(q-2)$. Отже, кількість вузлів визначається як $N_s^B = 2((q-1)^n - 1)/(q-2)$, так що ми отримуємо:

$$\begin{aligned} -\beta f &= -\frac{\beta F_n}{N_s^B} = \frac{q}{2} \ln(1 + z_A x^{q-1} + z_B y^{q-1}) \\ &\quad - \frac{q-2}{2} \ln(1 + z_A x^q + z_B y^q). \end{aligned} \quad (4.128)$$

Це і є шуканим виразом для вільної енергії, що припадає на один вузол ґратки Бете.

Подальший аналіз присвячений стійкості атракторів, які пов'язані з рекурентними співвідношеннями (4.120) при різних значеннях параметрів p , J та

з. Тут зустрічаються чотири різні випадки.

- У деякій області простору параметрів дві послідовності x_N та y_N збігаються до єдиного значення $x = y$ як $N \rightarrow \infty$, що відповідає неупорядкованій фазі з рівними середніми густинами частинок A та B . Надалі ми будемо називати таку фазу неупорядкованою симетричною фазою.
- У просторі параметрів є область, в якій x_N та y_N збігаються не до одного, а до різних граничних значень x та y у границі $N \rightarrow \infty$. Це означає, що в силу рівнянь (4.123), тут спонтанно порушується симетрія між частинками A та B і середні густини компонентів стають різними; одні з них (A або B з однаковою ймовірністю) присутні у більшості з вищою середньою густиною $\rho^{(+)}$, в той час як інші з'являються в меншості з середньою густиною $\rho^{(-)}$, $\rho^{(+)} > \rho^{(-)}$. Будемо називати таку фазу фазою з порушеною симетрією (phase with a broken symmetry, PBS).
- Існує третя ситуація, в якій x_N (y_N) з непарним N збігаються до одного значення x_{odd} ($y_{odd} = x_{odd}$), а для парного N збігаються до іншого значенням x_{even} ($y_{even} = x_{even}$). Така збіжність (так звана збіжність підпоследовательностей), як відомо, виникає у різних моделях статистичної механіки, означених на рекурсивних ґратках. Це прояв явища спонтанного впорядкування, при якому ґратка розбивається на дві підґратки, так що частинки A та B займають переважно тільки одну з двох підґраток, а друга підґратка майже порожня. У цій фазі середні густини обох сортів рівні одна одній, але є структурний порядок. Надалі ми будемо називати таку фазу симетричною фазою зі змінним порядком I (phase with an alternating order I, PAO I).
- Для деяких значень параметрів реалізується також і четверта ситуація, коли x_N з непарним N та y_N з парних N збігаються до одного значення $x_{odd} = y_{even}$, а x_N з парним N та y_N з непарним N збігаються до іншого значенням $x_{even} = y_{odd}$. Фізично це відповідає ситуації, коли частинки A займають переважно одну з підґраток, а B – іншу підґратку. Тут середні густини обох

сортів є рівними між собою. Ми називаємо таку фазу симетричною фазою зі змінним порядком II (phase with an alternating order II, PAO II).

Відмінною особливістю двох останніх ситуацій є наявність відповідних фазових переходів: при вході у PAO I із симетричної неупорядкованої фази і при виході з неї (або при зворотньому (reentrant) переході) у симетричну неупорядковану фазу. Точно так само при вході в PAO II відбувається неперервний фазовий перехід. Тут, щоб аналітично отримати збіжність підпоследовностей, ми повторюємо рекурсію (4.120), виражаючи x_N та y_N через x_{N-2} та y_{N-2} (замість x_{N-1} та y_{N-1}), так що N та $N - 2$ мають однакову парність. Далі аналіз проводиться так само, як для симетричної неупорядкованої фази або фази з порушеною симетрією, тобто ми розглядаємо границю $N \rightarrow \infty$ та концентруємося на вузлах, що належать ґратці Бете. Порядок переходів, які відбуваються при перетині лінії розмежування між різними фазами, визначається стандартним способом з аналізу поведінки вільної енергії [див. рівняння (4.128)] та термодинамічних властивостей в точках переходу.

Аналіз розв'язків зв'язаних рекурентних співвідношень (4.120) дозволяє побудувати повну фазову діаграму нашої моделі на ґратці Бете. Ми зображуємо її на рисунках 4.8 та 4.9 для окремого випадку $q = 3$. Зазначимо, що результати для $q = 3$ та $q > 3$ якісно подібні і відрізняються тільки точними значеннями параметрів, при яких має місце критична поведінка. Фазова діаграма для $q = 3$ представлена у просторі трьох параметрів: сили взаємодії J , хімічного потенціалу μ та середньої концентрації p каталітичних зв'язків, яка контролює амплітуду відштовхувальної взаємодії між сусідніми частинками різних сортів. Фазова діаграма показує, що бінарний ґратковий газ частинок з такими взаємодіями може перебувати або у симетричній фазі, в якій середні густини частинок A та B рівні одна одній, або у фазі, в якій така симетрія порушена (PBS) – тут середні густини обох сортів більше не рівні. Більш того, наш аналіз показує, що сама симетрична фаза ділиться на три підфази: неупорядковану симетричну фазу та симетричні фази з двома типами структурного чергування (PAO I та PAO II), властивості

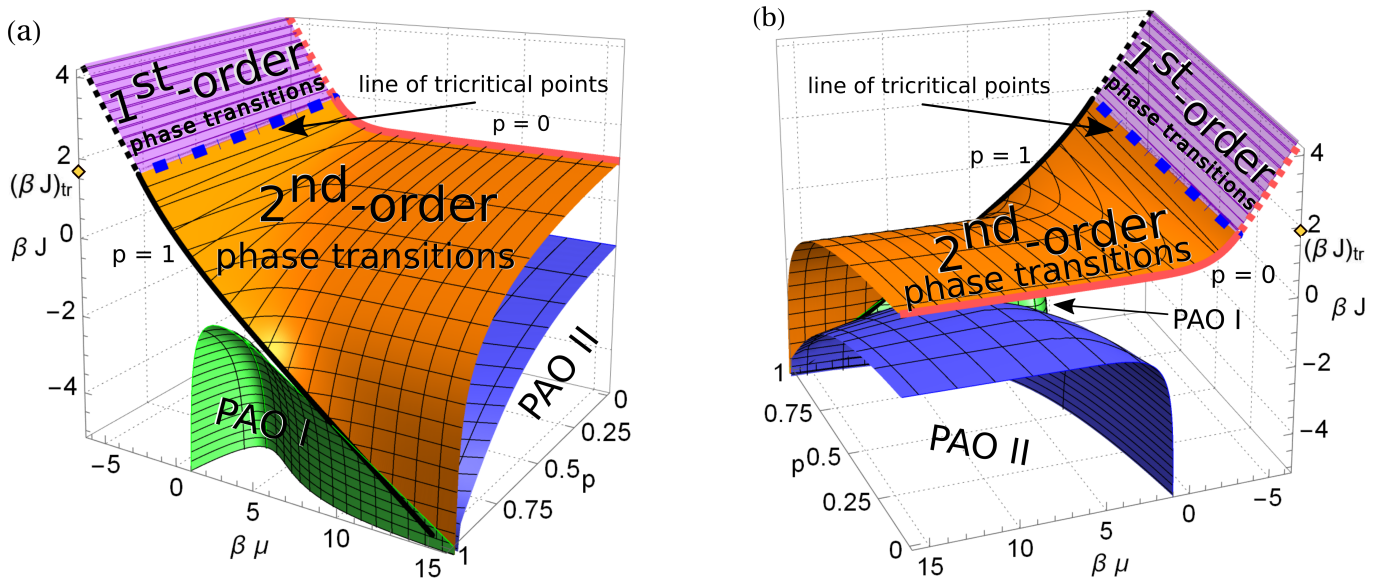


Рис. 4.8. Панель (а): Фазова діаграма у просторі параметрів (J, μ, p) для ґратки Бете з координаційним числом $q = 3$. Поверхня ділить простір параметрів на два підпростори: підпростір над поверхнею відповідає фазі з порушеною симетрією (PBS) (див. також панелі (b) на рисунках 4.10 та 4.11), а підпростір під поверхнею – симетричній фазі з рівними густинами частинок A та B . Товсті червоні та товсті чорні криві вказують на перетин поверхні розмежування з площинами $p = 0$ та $p = 1$. Частина поверхні (фіолетова) над товстою штрих-пунктирною кривою (синя) – лінія трикритичних точок – відповідає фазовому переходу першого роду у PBS, а під цією кривою (помаранчева поверхня) неперервний перехід (другого роду). Поверхні всередині симетричної невпорядкованої фази пов’язані з фазами зі змінним порядком (РАО): РАО I, в якій частинки A та B займають переважно одну з підґраток, а друга у той час майже порожня (підпростір розділений зеленою площиною), а в РАО II (підпростір розділений синьою площиною) два сорти розділяються таким чином, що частинки переважно проживають на двох різних підґратках. Панель (b) зображує фазову діаграму панелі (а), яка повернута на 90° , щоб зробити видимим РАО II.

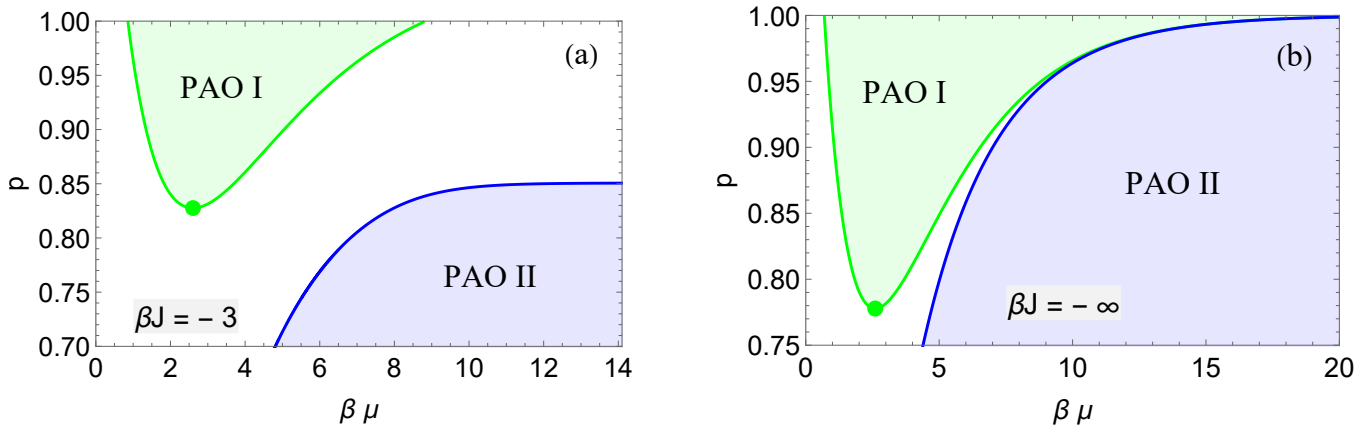


Рис. 4.9. Панелі (а) та (б) представляють фазові діаграми у площині (p, μ) для двох фіксованих значень J : $\beta J = -3$ (а) та $\beta J = -\infty$ (б), тобто для нескінченно сильного відштовхування між частинками одного й того ж сорту. Зафарбовані (зелені) кружечки позначають критичне значення $p_{c,1}$ параметра p , нижче якого PAO I не існує; $p_{c,1} \approx 0,8276$ (а) та $p_{c,1} = 7/9$ (б). Для $p \geq p_{c,1}$ PAO I існує для $\beta\mu$ в інтервалі $(\beta\mu)_{c,1} \leq \beta\mu \leq (\beta\mu)_{c,2}$, рівняння (4.134) та (4.135). PAO II виникає для $\beta\mu > (\beta\mu)_{c,3}$, рівняння (4.136) та $p \leq p_{c,2}$. Зокрема, $p_{c,2} \approx 0.8506$ для $\beta J = -3$ (а) та $p_{c,2} = 1$ для $\beta J = -\infty$ (б)

яких будуть обговорюватися в кінці цього підрозділу.

Симетрична фаза та фаза з порушеною симетрією (PBS)

Симетрична фаза і PBS розділені поверхнею розмежування, яка визначається розв'язком рівнянь (Б.9) та (Б.10), які представлені у Додатку Б.1. PBS знаходиться над поверхнею розмежування, а симетрична фаза, в якій середні густини частинок A та B рівні одна одній, знаходиться нижче цієї поверхні.

На цій поверхні існує лінія трикритичних точок, яка визначається як

$$(\beta J)_{tc} = \ln \left(4 - p + \sqrt{9 - 4p(1 - p)} \right). \quad (4.129)$$

Таким чином, значення βJ в трикритичній точці є повільно (логарифмічно) змінною функцією середньої густини каталітичних зв'язків; зокрема, для $p = 0$ (немає відштовхування між сусідніми частинками A та B) маємо $(\beta J)_{tc} = \ln(7) \simeq 1.946$. Для $p = 1$ (частинки A та B не можуть займати сусідні вузли) $(\beta J)_{tc} = \ln(6) \simeq 1.792$. Для проміжних значень p значення сили взаємодії $(\beta J)_{tc}$ в трикритичній

точці плавно інтерполюється між цими двома числами. Зауважимо, що $(\beta J)_{tc}$ завжди додатне, так що трикритичні точки існують тільки у випадку притягальної взаємодій між частинками одного й того ж сорту.

Припустимо тепер, що ми зафіксували $\beta\mu$ (або активність z) та p і змінюємо βJ від деякого великого від'ємного значення до додатнього, так що для певного значення βJ ми перетинаємо поверхню розмежування. Це критичне значення, тобто $(\beta J)_c$, відповідає точці переходу від фази з рівними густинами частинок A та B до PBS. Якщо такий перетин відбувається над лінією трикритичних точок, то перехід першого роду і проявляється у вигляді стрибка значення густини, а перехід під цією лінією відповідає неперервному переходу. Аналогічно, якщо ми зафіксуємо p та $\beta J > J(p)$, де $J(p)$ – деяке p -залежне порогове значення сили взаємодій між частинками одного й того ж сорту:

$$\beta J(p) = \ln(3(1-p)) \quad (4.130)$$

і збільшуючи $\beta\mu$ від деякого великого від'ємного значення до досить великого додатнього значення, ми змушуємо систему зазнавати фазового переходу у PBS. Рід переходу залежить від значень p та βJ : якщо $\beta J > (\beta J)_{tc}$ (4.129), перехід є першого роду, у той час як для $\beta J(p) < \beta J < (\beta J)_{tc}$ перехід є неперервним і відбувається при значенні активності, що дорівнює

$$z_c = \exp((\beta\mu)_c) = \frac{(e^{\beta J} + 3p - 1)^2}{4(e^{\beta J} - 3(1-p))(e^{\beta J} - 1 + p)^2}. \quad (4.131)$$

Для $\beta J < \beta J(p)$ (4.130) (цю нерівність також можна інтерпретувати як деяке обмеження, накладене на значення p), такий перехід не відбувається і система залишається в симетричній фазі при будь-якому значенні $\beta\mu$. З рівняння (4.131) випливає, що для $p = 0$ критичне значення активності просто $z_c = 1/(4(\exp(\beta J) - 3))$, (див. товста червона крива на рисунку 4.8), і, отже, при такому значенні p при $\beta J < \ln(3)$ перехід не відбувається. У зворотній границі, тобто при $p \rightarrow 1$ (див. товста чорна крива на рисунку 4.8), $J(p) \rightarrow -\infty$ і, отже, існує перехід для будь-якого знаку та значення J

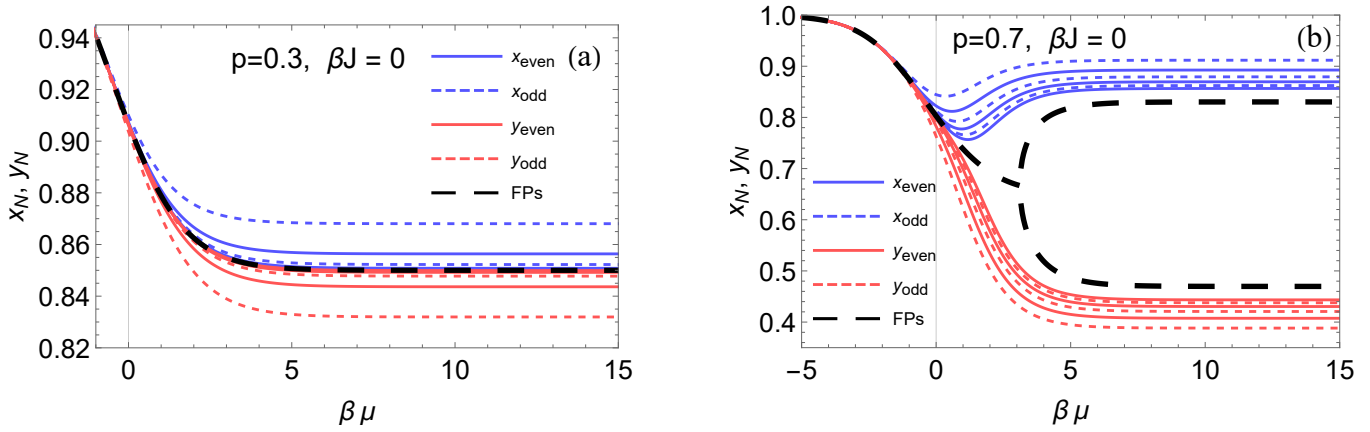


Рис. 4.10. Розв'язки $x_N = x_N(J, \mu, p)$ (сині криві) та $y_N = y_N(J, \mu, p)$ (червоні криві) рекурентних співвідношень (4.120) з $J = 0$ та $q = 3$ для $N = 3, \dots, 8$, побудовані як функції $\beta\mu$. Суцільні (штрихові) криві відповідають парним (непарним) N . Початкові значення: $x_0 = 1$ та $y_0 = 0$. Товсті пунктирні криві (чорні) представляють собою граничні ($N \rightarrow \infty$) розв'язки x та y – розв'язки типу нерухомої точки (НТ). (а): $p = 0.3$. x_N та y_N збігаються до одного й того ж значення $x = y$ у границі $N \rightarrow \infty$ [див. рівняння (Б.9)]. (б): $p = 0.7$. Спонтанне порушення симетрії у $\beta\mu_c$, рівняння (4.132) з подальшим переходом у PBS – x_N та y_N збігаються до граничних значень $x \neq y$ [див. рівняння (Б.10) та (Б.11)].

Щоб проілюструвати наведене вище загальне обговорення на конкретному прикладі, давайте розглянемо випадок $J = 0$, тобто випадок, коли частинки одного й того ж сорту не мають ніякої іншої взаємодії між собою, окрім твердого кору. У цьому випадку, очевидно, може бути тільки неперервний перехід, тому що $(\beta J)_{tc}$ завжди більше нуля. Більш того, неперервний перехід можливий тільки у тому випадку, якщо $J(p) < 0$, що накладає деякі обмеження на значення p : воно повинна бути більшим критичного значення $p^{(\text{Bet})} = 2/3$ [верхній індекс (Bet) означає, що це критичне значення для ґратки Бете]. У іншому випадку при $p < p^{(\text{Bet})}$ в системі не буде переходів ні при якому значенні хімічного потенціалу і вона залишиться у симетричній фазі. При $p > p^{(\text{Bet})}$, навпаки, відбудеться неперервний перехід у фазу з порушеною симетрією при z , що дорівнює

$$z_c = e^{(\beta\mu)_c} = \frac{9}{4(3p - 2)}. \quad (4.132)$$

На рисунку 4.10 ми ілюструємо різні види збіжності до граничної поведінки у

випадках, коли $p < p^{(\text{Bet})}$ або $p > p^{(\text{Bet})}$. З цією метою ми представляємо розв'язки x_N та y_N рекурентних співвідношень (4.120) з $J = 0$ та $q = 3$ для кількох значень $N = 3, \dots, 8$. Зауважимо, що для $p < p^{(\text{Bet})}$ [рисунок 4.10, (а)] розв'язки x_N та y_N збігаються з ростом N до одного й того ж значення $x = y$ – розв'язок типу нерухомої точки (НТ), який зображений товстою пунктирною чорною кривою – для будь-якого значення $\beta\mu$. Більш того, ми робимо висновок, що тільки розв'язки нижчого порядку по N відхиляються від розв'язку типу НТ; x_1 (пунктирна синя крива) та x_2 (суцільна синя крива) дещо вищі останнього, у той час як y_1 (пунктирна червона крива) та y_2 (суцільна червона крива) трохи нижче розв'язку типу НТ. Розв'язки з великим значенням N поступово стають ближчі та у підсумку не відрізняються від розв'язків типу НТ. З іншого боку, для $p > p^{(\text{Bet})}$ [рисунок 4.10, (b)] така збіжність має місце тільки для значень $\beta\mu$, які $\beta\mu < (\beta\mu)_c$ [рівняння (4.132)]. Якщо $\beta\mu$ перевищує критичне значення у рівнянні (4.132), відбувається порушення симетрії між x та y , так що x_N наближається зверху до верхньої гілки розв'язку типу НТ (тут криві для зростаючого N впорядковані зверху вниз), у той час як y_N наближається знизу до нижньої гілки (тут криві для зростаючого N впорядковані знизу до верху). Відзначимо, що при порушенні симетрії x_N виявляється більшим, ніж y_N (але не навпаки). Це обумовлено початковою умовою, яку ми тут вибрали: тобто $x_0 = 1$ та $y_0 = 0$. Відзначимо також, що збіжність в області з порушеною симетрією помітно повільніша. Дійсно, розв'язки з найбільшим з розглянутих N , тобто x_8 та y_8 , все ще знаходяться досить далеко від розв'язків типу НТ, навіть далеко від точки переходу. Видно, що в околиці останньої збіжність найповільніша.

Така поведінка розв'язків рекурентних співвідношень (4.120) через рівняння (4.123), що зв'язує x та y із середніми густинами, очевидно, перекладається у аналогічну поведінку середніх густин. На рисунку 4.11 зображена залежність середніх густин від $\beta\mu$ для обраних випадків. Ми бачимо, що для $p = 0.3$ (що нижче $p^{(\text{Bet})} = 2/3$) густина обох сортів є однаковою і монотонно зростає від нуля до граничного значення $1/2$ (коли $\beta\mu$ змінюється від $-\infty$ до $+\infty$), показуючи, що відштовхувальні взаємодії між різними сортами недостатньо сильні, щоб пе-

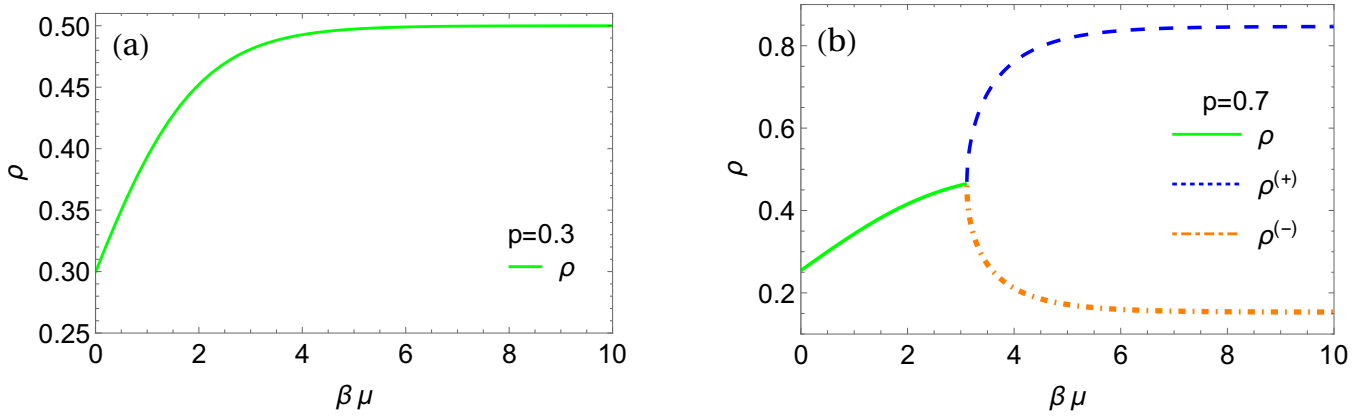


Рис. 4.11. Середні густини частинок A та B з твердим кором ($J = 0$) на ґратці Бете з $q = 3$ як функції $\beta\mu$ для двох значень p . (а): $p = 0.3 < p^{(\text{Bet})}$ та (б): $p = 0.7 > p^{(\text{Bet})}$. Суцільна (зелена) крива показує середню густину частинок $\rho = \rho^{(A)} = \rho^{(B)}$ у симетричній фазі, в якій вони рівні одна одній. Пунктирна (синя) та штрих-пунктирна (помаранчева) криві на (б) показують середні густини частинок $\rho^{(+)}$ та $\rho^{(-)}$ у PBS [див. рівняння (4.133)].

решкодити повному охопленню системи. І навпаки, для $p = 0.7$ (що перевищує $p^{(\text{Bet})} = 2/3$) ситуація виглядає інакше: тут середні густини обох сортів рівні одна одній для помірних значень $\beta\mu$, а потім, коли $\beta\mu$ наближається до критичного значення $(\beta\mu)_c$ [див. рівняння (4.132)], відбувається спонтанне порушення симетрії і всередині PBS густини більше не рівні. Якщо ми продовжимо збільшувати $\beta\mu$, обидві густини наблизатимуться до своїх граничних значень, які залежать від значення p :

$$\begin{aligned}\rho^{(+)}\Big|_{(\beta\mu)\rightarrow\infty} &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(8-3p)p-4}}{\left((5-2p)p-2\right)}, \\ \rho^{(-)}\Big|_{(\beta\mu)\rightarrow\infty} &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{\sqrt{(8-3p)p-4}}{\left((5-2p)p-2\right)},\end{aligned}\quad (4.133)$$

де підкореневий вираз додатний при $p > p^{(\text{Bet})}$ та обертається в нуль при $p = p^{(\text{Bet})}$. Зазначимо, що $\rho^{(+)}$ ($\rho^{(-)}$) – це монотонно зростаюча (спадна) функція від p та її максимальне (мінімальне) значення $\rho^{(+)} = 1$ ($\rho^{(-)} = 0$) досягається тільки при $p = 1$ та $\beta\mu = \infty$, тобто при нескінченно сильному відштовхуванні між різними сортами та для нескінченно великого хімічного потенціалу. Однак для $p^{(\text{Bet})} <$

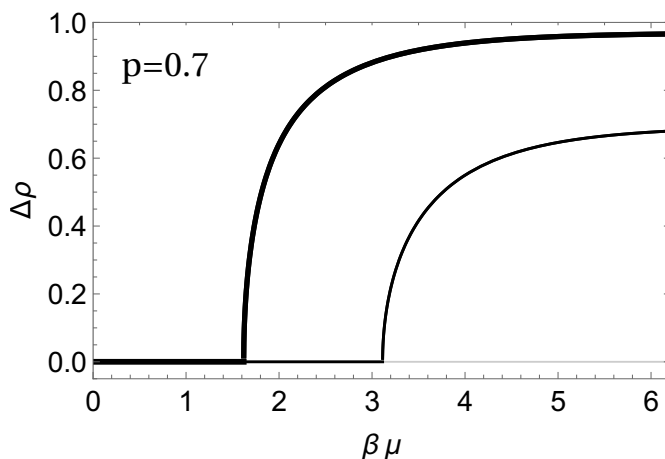


Рис. 4.12. Параметр порядку $\Delta\rho$ для $J = 0$ та $p = 0.7$ як функція $\beta\mu$. Тонка крива показує результат для ґратки Бете [див. рівняння (Б.15) у Додатку Б.1], а товста крива – аналогічний результат для ґратки Фушімі, рівняння (4.150).

$p < 1$ порушення симетрії не є повним навіть для $\beta\mu \rightarrow \infty$, оскільки ґратка не покривається повністю частинками одного із сортів і в системі ще присутня деяка кількість частинок іншого сорту, хоча і в значній меншості. Також відзначимо, що значення середніх густин, що відповідають нульовому хімічному потенціалу (тобто $\mu = 0$ або $z = 1$), несильно відхиляються від $1/3$ для обох випадків: $\rho \approx 0.2993$ (для $p = 0.3$) та $\rho \approx 0.2543$ (для $p = 0.7$) (див. також Додаток Б.1).

Поглянемо далі на скейлінг при переході у PBS. Для цього на рисунку 4.12 (тонка крива) зобразимо абсолютне значення $\Delta\rho$ різниці $\rho^{(A)}$ та $\rho^{(B)}$, $\Delta\rho = |\rho^{(A)} - \rho^{(B)}|$, як функцію $\beta\mu$, яке є природним параметром порядку у досліджуваній моделі. Очевидно, що $\Delta\rho$, яке явно означено у рівнянні (Б.15) у Додатку Б.1, тотожно дорівнює нулеві у симетричній фазі та стає відмінним від нуля у PBS. Ми бачимо, що зростання $\Delta\rho$ для $\mu > \mu_c$ досить круте; ми показуємо аналітично в Додатку Б.1, що параметр порядку поводить себе як $\Delta\rho \sim (\mu - \mu_c)^{1/2}$ в околиці $\mu = \mu_c$. Як ми вже відзначали, це передбачення середнього поля для значення критичного показника у випадку неперервного переходу, яке є наслідком того факту, що ґратка Бете є ефективно нескінченновимірною системою. У Додатку Б.1 ми також показуємо, що коли перехід у PBS відбувається на лінії трикритичних точок, $\Delta\rho \sim (\mu - \mu_c)^{1/4}$ в околиці $\mu = \mu_c$, що є ще одним добре

відомим середньо-польовим значенням критичного показника.

Симетрична фаза зі структурним впорядкуванням

Відзначимо, що обговорення у попередньому підрозділі не дає вичерпної картини, наприклад, на рисунку 4.13 ми зображуємо розв'язки рекурентних співвідношень (4.120) з $q = 3$, $p = 0.9$ та $\beta J = -5$ (тобто існує досить сильне відштовхування як між частинками одного сорту, так і частинками різних сортів), побудовані як функції $\beta\mu$. Досліджуючи рекурентні співвідношення (4.120), ми з'ясували, що існують дві області у просторі параметрів, розташовані всередині симетричної фази (обидві області виникають при досить великому від'ємному значенні βJ), в яких x_N та y_N з непарним та парним N збігаються до різних граничних значень, у той час як ми маємо $x_N = y_N$ як $N \rightarrow \infty$, тобто середні густини обох сортів є однакові. Іншими словами, в цих областях не відбувається порушення симетрії між середніми густинами частинок, як ми це бачили у підрозділі 4.2.2, але замість цього виникає деякий структурний порядок, який проявляється у порушенні симетрії між розв'язками, що мають різну парність. Як ми вже згадували, справа в тому, що тут система (нагадаємо, що ґратка Бете є дводольним графом) спонтанно розбивається на дві різні підґратки з різним покриттям частинками на кожній з них і розв'язки з парним N визначають заповнення однієї з підґраток, а розв'язки з непарним N – заповнення іншої. Нижче ми покажемо, що ці особливі області відповідають фазам зі змінним порядком: одна з них – фаза (РАО I), в якій як частинки сорту A , так і частинки сорту B з'являються переважно на одній і тій же підґратці, залишаючи друга підґратку майже порожньою, тоді як у другій фазі (РАО II) частинки A займають переважно одну підґратку, а частинки B з'являються переважно на другій.

Зокрема, існують (див. виведення у Додатку Б.1) три критичних значення активності z (логарифми яких визначають відповідні критичні значення хімічного

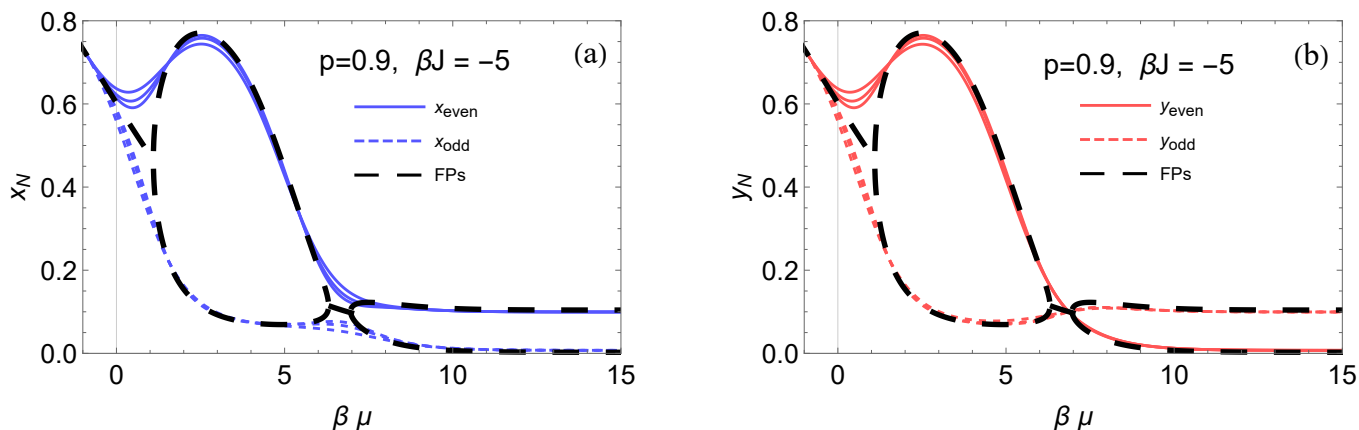


Рис. 4.13. Розв'язки $x_N = x_N(J, \mu, p)$ (a) та $y_N = y_N(J, \mu, p)$ (b) рекурентних співвідношень (4.120) з $q = 3$, $p = 0.9$ та $\beta J = -5$, як функції $\beta\mu$. Початкові умови: $x_0 = 1$ та $y_0 = 0$. Суцільні криві відповідають парним N , штрихові – непарним N , а товста (чорна) пунктирна крива зображує розв'язки типу НТ. Для $\beta\mu < (\beta\mu)_{c,1}(p, J)$ та $(\beta\mu)_{c,2}(p, J) < \beta\mu < (\beta\mu)_{c,3}(p, J)$ x_N та y_N збігаються до одного й того ж розв'язку $x = y$, незалежно від парності N , що відповідає симетричній невпорядкованій фазі. Для $(\beta\mu)_{c,1}(p, J) < \beta\mu < (\beta\mu)_{c,2}(p, J)$, x_N та y_N з непарним N збігаються до $x_{odd} = y_{odd}$ як $N \rightarrow \infty$, а розв'язки з парним N збігаються у цій границі до $x_{even} = y_{even}$, це відповідає фазі зі змінним порядком РАО I. Для $\beta\mu > (\beta\mu)_{c,3}(p, J)$ x_N з парним N та y_N з непарним N збігаються до однієї і тієї ж граничної кривої $x_{even} = y_{odd}$, а x_N з непарним N та y_N з парним N збігаються до $x_{odd} = y_{even}$, це відповідає фазі зі змінним порядком РАО II.

потенціалу):

$$z_{c,1}(p, J) = \frac{3p(6-p) - 11 - 3e^{2\beta J} - 6(3-p)e^{\beta J} - \sqrt{(9p-7-9e^{\beta J})(1+p-e^{\beta J})^3}}{8(1-p+e^{\beta J})^3}, \quad (4.134)$$

$$z_{c,2}(p, J) = \frac{3p(6-p) - 11 - 3e^{2\beta J} - 6(3-p)e^{\beta J} + \sqrt{(9p-7-9e^{\beta J})(1+p-e^{\beta J})^3}}{8(1-p+e^{\beta J})^3}, \quad (4.135)$$

та

$$z_{c,3}(p, J) = \frac{(3e^{\beta J} + p - 3)^2}{4(e^{\beta J} + p - 1)^2(1 - 3e^{\beta J} - p)}, \quad (4.136)$$

які окреслюють межі фаз зі змінним порядком. Тепер ми зупинимося на розташуванні та властивостях цих фаз.

(i) Невпорядкована симетрична фаза існує тільки тоді, коли $\beta\mu < (\beta\mu)_{c,1}(p, J)$ або коли $\beta\mu$ знаходиться у обмеженому інтервалі $(\beta\mu)_{c,2}(p, J) < \beta\mu < (\beta\mu)_{c,3}(p, J)$. У цьому діапазоні значень хімічного потенціалу розв'язки рекурентних співвідношень (4.120), незалежно від парності N , збігаються до одного й того ж значення $x = y$, яке є розв'язком типу НТ. Звідси випливає, що тут $\rho^{(A)} = \rho^{(B)}$ [див. рівняння (4.123)].

(ii) Коли $\beta\mu$ перевищує $(\beta\mu)_{c,1}(p, J)$, система через неперервний перехід входить у РАО I, в якій симетрія між розв'язками з різною парністю є порушеною. Дійсно, тут ми маємо, що x_N (y_N) з парними N та непарними N збігаються до різних граничних кривих – x_{even} ($y_{even} = x_{even}$) та x_{odd} ($y_{odd} = x_{odd}$). Наприклад, на рисунку 4.13 ми бачимо, що для $\beta\mu \approx 3$ розв'язки x_{even} та y_{even} досягають свого максимального значення $x_{even} = y_{even} \approx 0.8$, у той час як x_{odd} та y_{odd} близькі до свого мінімального значення $x_{odd} = y_{odd} \approx 0.1$. Це означає, що в силу рівняння (4.123) на одній з підґраток ми маємо $\rho^{(A)} = \rho^{(B)} \approx 0.48$, тобто дуже високий рівень покриття частинками обох сортів, які знаходяться у рівній кількості, а для іншої підґратки ми маємо $\rho^{(A)} = \rho^{(B)} \approx 0.02$, тобто ця підґратка майже повністю позбавлена частинок. Система залишає цю фазу і знову входить у симетричну неупорядковану фазу через неперервний (реентрантний) перехід, коли $\beta\mu = (\beta\mu)_{c,2}(p, J)$.

Зауважимо, що $z_{c,1}(p, J)$ та $z_{c,2}(p, J)$ у рівняннях (4.134) та (4.135) повинні бути дійсними додатніми числами. Остання умова означає, що існують деякі обмеження на значення p та J . А саме, РАО I може існувати тільки тоді, коли p та βJ задовільняють одночасно умови

$$p \geq p_c = \frac{7}{9} + e^{\beta J} \quad \text{та} \quad \beta J \leq \ln(2/9), \quad (4.137)$$

які визначають положення цієї фази на фазовій діаграмі на рисунках 4.8 та 4.9.

(iii) При $\beta\mu = (\beta\mu)_{c,3}(p, J)$ система через неперервний перехід входить із симетричної неупорядкованої фази у РАО II і залишається в цій фазі для будь-якого $\beta\mu \in ((\beta\mu)_{c,3}(p, J), \infty)$, тобто поширюється на нескінченно великі значення хімічного потенціалу. Як видно на рисунку 4.13, на цьому етапі важливою особливістю є те, що, хоча розв'язки x_N з парним N та непарним N зберігають свій порядок у тому сенсі, що $x_{even} > x_{odd}$, подібно як це відбувається всередині РАО I, розв'язки y_N з парним N вибирає тут нижню гілку розв'язку типу НТ, а розв'язок з непарним N вибирає верхню гілку, така що $y_{odd} > y_{even}$ в РАО II. Отже, відбувається спонтанне порушення симетрії між розв'язками з різною парністю, так що система розбивається на дві підґратки, але розташування частинок на кожній з них зовсім інше, ніж в РАО I. Припустимо, що ми беремо $\beta\mu = 10$, що цілком відповідає цій фазі. Тоді матимемо, що тут $x_{even} = y_{odd} \approx 0,09$ та $x_{odd} = y_{even} \approx 0,01$. З рівняння (4.123) випливає, що на одній з підґраток $\rho^{(A)} \approx 0.48$ та $\rho^{(B)} \approx 0.02$, а на іншій підґратці ситуація відрізняється – $\rho^{(A)} \approx 0.02$ та $\rho^{(B)} \approx 0.48$. Отже, РАО II – це фаза зі змінним структурним порядком, але тут система розділяється на дві підґратки, кожна з яких переважно зайнята тільки одним сортом частинок.

Для існування РАО II необхідно, щоб критична активність $z_{c,3}(p, J)$ у рівнянні (4.136) була дійсним додатнім числом. Це може бути реалізовано тільки при таких значеннях p та J , які задовільняють нерівність

$$1 - 3e^{\beta J} - p \geq 0, \quad (4.138)$$

яка разом з умовою $\beta\mu \geq (\beta\mu)_{c,3}(p, J)$ визначає положення РАО II на фазовій діаграмі на рисунках 4.8 та 4.9.

Нарешті, відзначимо, що перехід від РАО I до РАО II при збільшенні хімічного потенціалу відбувається через симетричну неупорядковану фазу. Таким чином, залишаючи РАО I, система втрачає структурний порядок та стає неупорядкованою. При вході у РАО II система відновлює структурний порядок, але вже іншого типу. Безпосередньо можна перевірити, що різниця $(\beta\mu)_{c,3}(p, J) - (\beta\mu)_{c,2}(p, J)$, яка визначає діапазон значень хімічного потенціалу, при якому система знаходиться у неупорядкованій фазі, завжди додатня та скінченна. Ця різниця зникає тільки для систем з $p = 1$ (тобто при нескінченно сильному відштовхуванні між частинками різного сорту) та коли досягається границя нескінченно сильного відштовхування між частинками одного й того ж сорту, тобто $J \rightarrow -\infty$.

4.2.3. Ґратка Фушімі

У цьому розділі ми розглянемо нашу модель на дереві Фушімі [див. рисунок 4.7, (b)]. У нашому аналізі ми йдемо тим же шляхом, що і у випадку Ґратки Бете. Спочатку ми оцінюємо відповідні рекурентні співвідношення, яким підкоряється статистична сума, а потім переходимо до границі $N \rightarrow \infty$, концентруючись на поведінці внутрішніх вузлів, що знаходяться далеко від граничних вузлів. Ця геометрична конструкція репрезентує так звану Ґратку Фушімі. Виведення рекурентних співвідношень виконуються для довільних J_A, J_B, z_A та z_B і t – кількості трикутників, що зустрічаються у кожній вершині. Остаточні результати представлені та обговорюються для симетричного випадку з $J_A = J_B = J$ та $z_A = z_B = z$, а також для найпростішої нетривіальної геометрії з $t = 2$, що відповідає наближенню так званої Ґратки Каґоме.

Спочатку ми формально запишемо $Z(p)$ у рівнянні (4.113), означеному на дереві Фушімі, у формі рівняння (4.115), тобто розглянемо три можливі події щодо зайнятості кореневого вузла,

$$Z(p) = D_N^t(0, p) + z_A^{1-t} D_N^t(A, p) + z_B^{1-t} D_N^t(B, p), \quad (4.139)$$

де $D_N(0, p)$, $D_N(A, p)$ та $D_N(B, p)$ – відповідно великі канонічні статистичні суми

однієї гілки з кореневим вузлом, який вільний або зайнятий частинкою A , або ж зайнятий частинкою B . Рекурентні співвідношення, яким підкоряються ці великі канонічні статистичні суми, перераховані у Додатку **Б.2** (див. рівняння (Б.31) та (Б.32)).

Вводячи наступні допоміжні змінні

$$x_N = \frac{D_N(A, p)}{z_A D_N(0, p)} \quad \text{та} \quad y_N = \frac{D_N(B, p)}{z_B D_N(0, p)}, \quad (4.140)$$

ми знаходимо, що вони підкоряються (для довільних J_A, J_B, z_A, z_B та t) наступній системі зв'язаних рівнянь:

$$\begin{aligned} x_N &= \frac{1+2e^{\beta J_A} \xi + 2(1-p)\eta + 2(1-p)^2 e^{\beta J_A} \xi \eta + e^{3\beta J_A} \xi^2 + (1-p)^2 e^{\beta J_B} \eta^2}{1+2\xi + 2\eta + 2(1-p)\xi\eta + e^{\beta J_A} \xi^2 + e^{\beta J_B} \eta^2}, \\ y_N &= \frac{1+2(1-p)\xi + 2e^{\beta J_B} \eta + 2(1-p)^2 e^{\beta J_B} \xi \eta + e^{3\beta J_B} \eta^2 + (1-p)^2 e^{\beta J_A} \xi^2}{1+2\xi + 2\eta + 2(1-p)\xi\eta + e^{\beta J_A} \xi^2 + e^{\beta J_B} \eta^2}, \end{aligned} \quad (4.141)$$

з позначеннями $\xi = z_A x_{N-1}^{(t-1)}$ та $\eta = z_B y_{N-1}^{(t-1)}$. Рівняння (4.141) мають істотно більш складну форму (навіть у симетричному випадку), ніж аналогічні у рівняннях (4.120), які отримані для ґратки Бете.

Далі ми переходимо до границі $N \rightarrow \infty$ та розглядаємо тільки ті вузли, які знаходяться глибоко всередині дерева Фушімі (тобто належать ґратці Фушімі). Ми знаходимо, що рекурентні співвідношення (4.141) збігаються до розв'язків типу НТ x та y , які можуть бути рівні один одному або відрізнитись і, таким чином, відповідати різним термодинамічним фазам. З цього моменту ми зосередимося на симетричному випадку, а також покладемо $t = 2$.

Як і у випадку ґратки Бете (див. Додаток **Б.1**), подальший аналіз зручно проводити у змінних $u = (x + y)/2$ та $v = (x - y)/2$. Замінивши змінні x та y у рівняннях (4.141) на u та v , ми виявимо, що останні підкоряються нелінійним рівнянням виду

$$\begin{aligned} u &= \frac{1+2z(1-p+e^{\beta J})u + 2z^2 e^{\beta J}(e^{2\beta J} + (1-p)^2)u^2 + z^2 e^{\beta J}((1-p)^2 - e^{2\beta J})(u^2 - v^2)}{1+4zu(1+ze^{\beta J}u) + 2z^2((1-p) - e^{\beta J})(u^2 - v^2)}, \\ v &= 2z(e^{\beta J} - (1-p))v \frac{1+ze^{\beta J}(1-p+e^{\beta J})u}{1+4zu(1+ze^{\beta J}u) + 2z^2((1-p) - e^{\beta J})(u^2 - v^2)}. \end{aligned} \quad (4.142)$$

Система рівнянь (4.142) має два розв'язки.

(i) Розв'язок із $v = 0$, який означений наступним чином

$$2z^2 (1 - p + e^{\beta J}) u^3 + z (4 - ze^{\beta J} (e^{2\beta J} + 3(1 - p)^2)) u^2 + (1 - 2z (1 - p + e^{\beta J})) u - 1 = 0. \quad (4.143)$$

Цей розв'язок відповідає симетричній фазі, в якій частинки A та B присутні з однаковою середньою густиною. Аналогічна фаза, яка спостерігається на ґратці Бете, яку ми назвали неупорядкованою симетричною фазою.

(ii) Розв'язок із $v \neq 0$, який означений парою рівнянь:

$$2z^2 e^{\beta J} (2(1 - p) + e^{\beta J}) (e^{\beta J} - (1 - p)) u^2 - z (4(1 - p) - e^{\beta J} (e^{\beta J} + 1 - p) (2 - ze^{\beta J} (e^{2\beta J} - (1 - p)^2))) u + \frac{1}{2} e^{\beta J} (e^{\beta J} + 1 - p) (1 - 2z (e^{\beta J} - (1 - p))) - 1 = 0, \quad (4.144)$$

та

$$\frac{1}{2z} + 2u(1 + ze^{\beta J} u) + z (1 - p - e^{\beta J}) (u^2 - v^2) = (e^{\beta J} - (1 - p)) (1 + ze^{\beta J} (1 - p + e^{\beta J}) u). \quad (4.145)$$

Цей розв'язок відповідає фазі із порушеною симетрією, в якій середні густини компонентів більше не рівні одна одній.

Далі параметричне рівняння, яке неявно визначає положення частини поверхні (яка відповідає неперервному фазовому переходу), що розділяє ці дві фази, може бути отримане, якщо припустити, що рівняння (4.143) та (4.144) виконуються одночасно. В результаті, ми отримаємо досить громіздкий вираз (Б.38), який представлено у Додатку Б.2, разом з відповідним точним виразом для критичного значення активності – рівняння (Б.39). У свою чергу, частина такої поверхні, яка відповідає фазовому переходу першого роду, отримується стандартним способом, прирівнюючи вільні енергії [див. рівняння (Б.34)] симетричної фази та фази з порушеною симетрією. У підсумку ми отримаємо рівняння (Б.40), яке визначає лінію трикритичних точок. Природно, з огляду на більш складну форму рекурентних співвідношень, яким підкоряється статистична сума дерева Фушімі, результат у

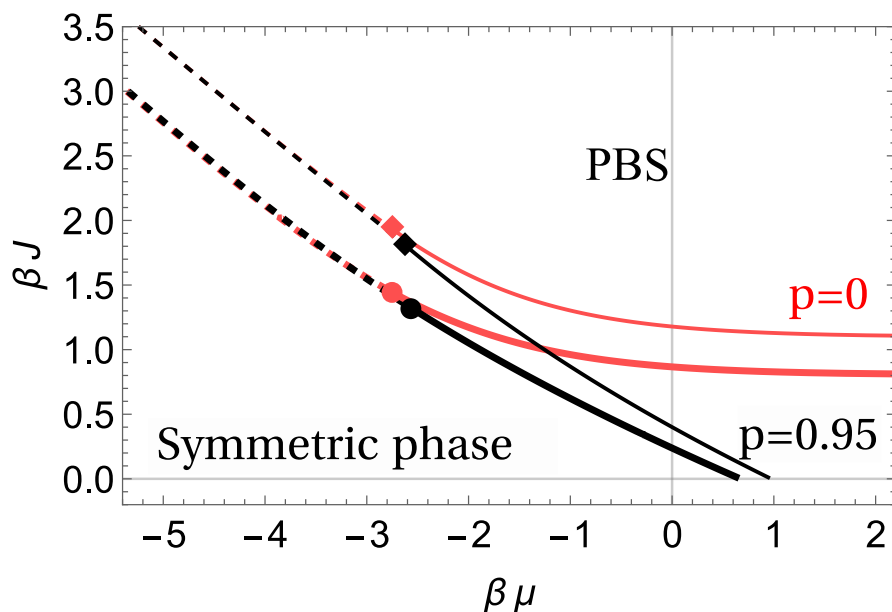


Рис. 4.14. Фазова діаграма моделі на ґратці Фушімі (товсті криві) та ґратці Бете (тонкі криві) для двох фіксованих значень параметра p . Червоні криві відповідають $p = 0$ (відсутність відштовхування між різними сортами частинок), а чорні криві – $p = 0.95$ (сильне відштовхування між різними сортами частинок). Суцільні криві – лінії неперервного фазового переходу, штрихові криві – лінії фазового переходу першого роду. Зауважимо, що лінії фазового переходу першого роду слабо залежать від значення параметру p в обох випадках. Лінії фазових переходів першого та другого родів перетинаються у трикритичних точках, позначених ромбами для ґратки Бете та кружками для ґратки Фушімі.

рівнянні (Б.40) набагато складніший, ніж його аналог у рівнянні (4.129) для ґратки Бете. У свою чергу, критичний параметр $\beta J(p)$ у випадку ґратки Фушімі визначається простим виразом

$$\beta J(p) = \ln(\sqrt{5}(1-p)), \quad (4.146)$$

і, таким чином, відрізняється від свого аналога для ґратки Бете у рівнянні (4.130) тільки числовим множником. Нагадаємо, що перехід не відбувається для $J < J(p)$, так що система завжди знаходиться у неупорядкованій симетричній фазі.

На рисунку 4.14 ми зображуємо фазову діаграму моделі на ґратці Фушімі (для порівняння ми представляємо разом з її аналогом, який отриманий для ґратки Бете, що дозволяє зробити деякі загальні висновки) для двох значень ($p = 0$ та $p = 0.95$) середньої концентрації каталітичних зв'язків. Ми бачимо, що в за-

гальному випадку перехід у фазу з порушеною симетрією для систем з одним і тим же J (який встановлює силу взаємодії між частинками одного й того ж сорту), і тим самим значенням p (який визначає силу відштовхувальних взаємодій між різними сортами частинок) виникає на ґратці Фушімі при більш низьких значеннях хімічного потенціалу, ніж на ґратці Бете. Така поведінка може бути пов'язана з тим фактом, що на ґратці Фушімі через його специфічну геометрію система більш фрустрована, ніж у випадку ґратки Бете, так що здається їй дещо легше порушити симетрію між компонентами. Таким чином, початок критичної поведінки зміщений у бік менших значень $\beta\mu$. Далі ми розуміємо, що сила відштовхувальних взаємодій між частинками різних сортів не впливає будь-яким помітним чином на положення лінії критичних точок, які відповідають фазовому переходу першого роду, як для ґратки Фушімі, так і для ґратки Бете. Дійсно, ми бачимо, що на ґратці Фушімі для $p = 0$ (коли такі відштовхувальні взаємодії повністю відсутні) та для $p = 0.95$ (коли такі взаємодії сильні) – товсті пунктирні криві на рисунку 4.14 майже перекривають одна одну. Те ж саме відбувається у випадку ґратки Бете (див. тонкі пунктирні криві на рисунку 4.14). І, навпаки, точне розташування ліній критичних точок, які відповідають неперервному фазовому переходу, дуже сильно залежать від значення p як для ґратки Фушімі, так і для ґратки Бете. Як наслідок, розташування трикритичних точок залежить від значень середньої концентрації каталітичних зв'язків p .

Було б повчально розглянути фазову діаграму більш докладно для конкретного випадку. З цією метою ми знову сконцентруємося на границі, коли $J = 0$ (немає жодної взаємодії між частинками одної того ж сорту, окрім твердого ко-ру). Подібно до поведінки на ґратці Бете, тут є тільки неперервний перехід між симетричною неупорядкованою фазою та фазою з порушеною симетрією. Критичне значення активності z_c , при якому відбувається такий перехід, визначається квадратним рівнянням

$$z_c^2 + \frac{4(4-3p)(4-5p)}{8(1-p)(4-5p(2-p))} z_c + \frac{32-25p}{8(1-p)(4-5p(2-p))} = 0, \quad (4.147)$$

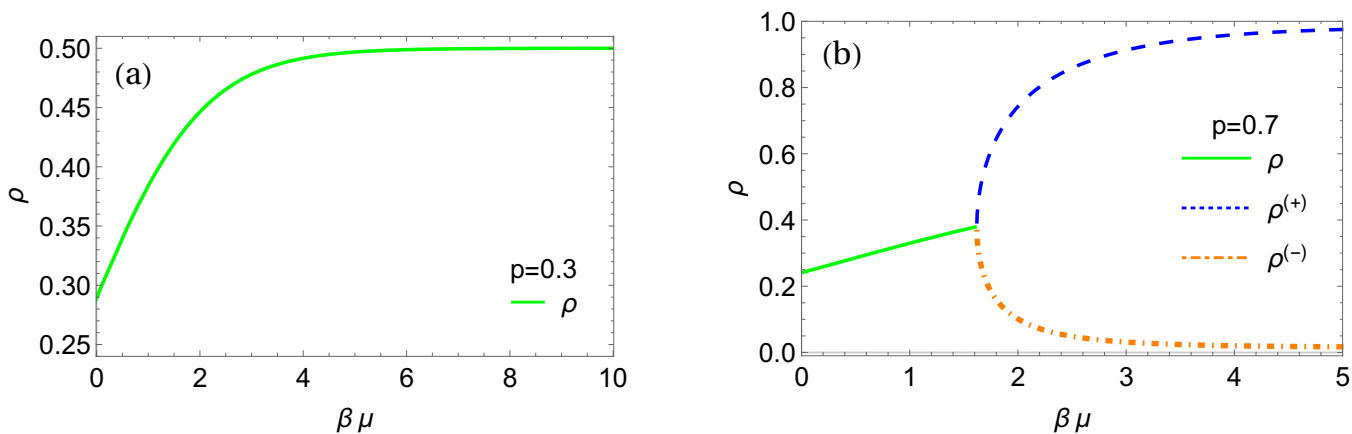


Рис. 4.15. Ґратка Фушімі з $J = 0$. Середня густина частинок як функція $\beta\mu$ для двох випадків середньої концентрації каталітичних зв'язків: (a) $p = 0.3 < p^{(\text{Hus})}$, (b) $p = 0.7 > p^{(\text{Hus})}$. Зелені криві відповідають густині $\rho = \rho^{(A)} = \rho^{(B)}$, сині та помаранчеві криві відповідають середнім густинам частинок у фазі з порушеною симетрією, граничні значення яких $\rho^{(+)}$ та $\rho^{(-)}$ вказані у рівняннях (4.149). Перехід з симетричної фази у фазу з порушеною симетрією відбувається при критичних значеннях хімічного потенціалу, означеному у рівнянні (4.148).

де єдиний дійсний та додатний корінь задається наступним чином:

$$z_c(p) = \frac{5\sqrt{p(2-p)} + 15p + 17}{20 \left(p - \frac{\sqrt{5}-1}{\sqrt{5}} \right) \left(\frac{\sqrt{5}+1}{\sqrt{5}} - p \right)}. \quad (4.148)$$

Як можна побачити з рівняння (4.148), критичне значення активності $z_c(p)$ є від'ємним, а отже нефізичним для p нижче критичного значення $p^{(\text{Hus})} = (\sqrt{5} - 1)/\sqrt{5} \approx 0.553$. Таким чином, при $p < p^{(\text{Hus})}$ в системі не відбувається фазового переходу. Зазначимо, що фаза з порушеною симетрією може таким чином з'явитися на ґратці Фушімі при менших значеннях p , ніж у випадку ґратки Бете, оскільки $p^{(\text{Hus})} < p^{(\text{Bet})}$.

На рисунку 4.15 ми зображуємо середні густини частинок A та B як функції $\beta\mu$ для двох випадків: $p < p^{(\text{Hus})}$ та $p > p^{(\text{Hus})}$. Зауважимо, що в цілому поведінка дуже схожа на поведінку на ґратці Бете (див. рисунок 4.11) та відрізняється тільки місцем розташування критичних точок. Дійсно, ми бачимо, що при $p = 0.3 < p^{(\text{Hus})}$ обидві середні густини рівні одна одній для будь-якого зна-

чення $\beta\mu$ та прямують до свого граничного значення рівному $1/2$, коли значення хімічного потенціалу прямує до нескінченності. При $p = 0.7 > p^{(\text{Hus})}$, як і у випадку ґратки Бете [див. рисунок 4.11 (b)], середні густини рівні одна одній для досить малих значень $\beta\mu$, а потім при певному значенні хімічного потенціалу симетрія порушується і один з сортів (що рівноймовірно як для частинок сорту A , так і для частинок сорту B) виявляється у більшості з середньою густиною $\rho^{(+)}$, а другий стає міноритарним компонентом із середньою густиною $\rho^{(-)}$. У границі $\beta\mu \rightarrow \infty$ густини у фазі з порушеною симетрією наближаються до своїх граничних p -залежних значень:

$$\begin{aligned}\rho^{(+)}\Big|_{(\beta\mu)\rightarrow\infty} &= \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{p(2-p)(5(2-p)p-4)}}{2(3(2-p)p-2)}, \\ \rho^{(-)}\Big|_{(\beta\mu)\rightarrow\infty} &= \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{p(2-p)(5(2-p)p-4)}}{2(3(2-p)p-2)},\end{aligned}\quad (4.149)$$

які мають більш складну форму, ніж знайдені для ґратки Бете [див. рівняння (4.133)]. Зауважимо, що отримана поведінка аналогічна поведінці на ґратці Бете – повне порушення симетрії відбувається тільки для $p \equiv 1$ і в цьому випадку $\rho^{(+)} = 1$ та $\rho^{(-)} = 0$. Для будь-якого проміжного значення p , відмінного від 1, в системі частинок одного сорту значно більше ніж іншого. Також відзначимо, що аналогічно тому, як це спостерігалось для ґратці Бете, значення середніх густин на ґратці Фушімі не надто далекі від $1/3$ для нульового хімічного потенціалу (див. Додаток Б.2). Нарешті, на рисунку 4.12 ми зображуємо параметр порядку $\Delta\rho$ для моделі на ґратці Фушімі, який явно визначається (деталі виведення див. у Додатку Б.2) як

$$\Delta\rho = |\rho^{(A)} - \rho^{(B)}| = \frac{4zuv}{1 + 2z(u^2 + v^2)}.\quad (4.150)$$

Зауважимо, що $\Delta\rho$ рівний нулеві ($v = 0$) у симетричній фазі і має ненульове значення у фазі з порушеною симетрією. Як впливає з рисунку 4.12, параметр порядку на ґратці Фушімі демонструє по суті таку ж поведінку, як і його аналог

для ґратки Бете. Єдині відмінності полягають у наступному: а) критична точка на ґратці Фушімі зміщена у бік менших значень хімічного потенціалу і б) $\Delta\rho$ на ґратці Фушімі досягає істотно більш високих значень при фіксованому $\beta\mu$, ніж його аналог на ґратці Бете, а це означає, що вплив порушення симетрії вищий на ґратці Фушімі, ніж на ґратці Бете.

На завершення ми звертаємося до питання чи існують на ґратці Фушімі фази зі змінним порядком, які ми спостерігали для ґратки Бете. Насправді, тут ситуація виглядає вельми делікатною, як це було показано в роботі [265]. Справа у тому, що для систем з відштовхувальними міжчастинковими взаємодіями (або антиферромагнітними взаємодіями для спінових моделей), які означені на ґратках з геометричною фрустрацією, надійний аналіз повинен із самого початку базуватися на описі, який включає всі можливі підґратки. Іншими словами, у нашому випадку необхідно одночасно розглядати рекурентні співвідношення, яким підкоряються допоміжні статистичні суми на всіх трьох підґратках, тобто ми повинні розглянути шість зв'язаних нелінійних рівнянь замість (4.141). Зокрема, такий підхід – єдиний спосіб визначити антиферромагнітний фазовий перехід на квадратній ґратці Фушімі [266]. При цьому шляхом чисельної перевірки отриманих рівнянь ми виявили, що для розглянутого випадку з $t = 2$ фізично правдоподібні вирази для коренів, які повинні бути дійсними та додатними, виникають тільки тоді, коли допоміжні статистичні суми, означені для різних підґраток, рівні одна одній. Нагадаємо, що аналогічне спостереження було зроблено для антиферромагнітної спін-1 моделі на ґратці Фушімі [211]. Таким чином, ми робимо висновок, що на ґратці Фушімі з $t = 2$ немає фази змінного порядку. Звичайно, це не виключає такої можливості для аналогічно побудованих псевдоґраток з $t \geq 3$. Зазначимо, що технічно дуже складно впоратися зі системами з $t \geq 3$ через сильний нелінійний характер рекурентних співвідношень (4.141).

4.3. Висновки до розділу

Таким чином, ми дослідили термодинамічні рівноважні властивості двокомпонентних адсорбатів, що утворюються в процесі двосортних реакцій $A + B \rightarrow \emptyset$, що відбуваються на одновимірній ґратці з випадково розташованими каталітичними елементами. Ми розглянули два типи таких каталітичних елементів, а саме: модель з випадково розташованими каталітичними зв'язками (модель I), які викликають миттєву реакцію між частинками різного сорту, що з'являються на сусідніх вузлах, які пов'язані таким зв'язком, та модель з випадково розташованими каталітичними вузлами (модель II). В цьому випадку реакція між частинками різного сорту відбувається миттєво, як тільки хоча б одна з них знаходиться на каталітичному вузлі. Також були розглянуті два типи безладу: випадок, коли безлад є відпаленим та більш складний випадок замороженого безладу у просторовому розподілі каталітичних елементів.

Для обох типів каталітичних елементів і для обох типів безладу ми знайшли точні розв'язки. Для моделі I та моделі II з відпаленим безладом ми отримали точні результати для усередненої за безладом великої канонічної статистичної суми i , отже, для тиску адсорбату та його термодинамічних похідних. Ми також детально обговорили асимптотичну поведінку усередненої за безладом густини частинок для малих та великих значень активності z_A та z_B , а також її залежність від концентрації каталітичних зв'язків або каталітичних вузлів. У випадку замороженого безладу проблема усереднення логарифма великої канонічної статистичної суми розв'язувалась двома підходами. У першому підході ми звели задачу до комбінаторного перерахунку всіх можливих повністю зв'язаних (повністю каталітичних) кластерів із фіксованими положеннями каталітичних зв'язків чи вузлів і знаходженню точних виразів для статистичних ваг таких кластерів. У другому підході ми переформулювали досліджувані моделі у термінах загальної спін-1 моделі [258], що дозволило нам представити усереднений за безладом тиск як усереднений логарифм сліду нескінченного добутку випадкових матриць розміром 3×3 – взаємно нескорельованих для моделі I та попарно скорельованих у випадку

моделі II. У такому представленні також були знайдені точні розв'язки, що дають нетривіальні приклади нескінченних добутків випадкових матриць, для яких показник Ляпунова може бути розрахований у явному вигляді.

Також ми дослідили тут рівноважні властивості двокомпонентних адсорбатів, що утворюються в процесі двосортних реакцій $A + B \rightarrow \emptyset$, що відбуваються на псевдоґратках Бете та Фушімі з каталітичними зв'язками, які розміщені випадково за сценарієм відпаленого безладу. На відміну від одновимірної задачі у цьому випадку частинки одного й того ж сорту відчують взаємодії найближчих сусідів з амплітудою J , яка є однаковою для пар AA та BB і може бути як додатньою, так і від'ємною. Для двох типів псевдоґраток ми отримали повну фазову діаграму двокомпонентного адсорбату. Ми показали, що фазова діаграма досить складна та складається з декількох фаз. Більш конкретно, ми продемонстрували, що існує фаза зі спонтанно порушеною симетрією між частинками A та B , в якій вони присутні з двома різними середніми густинами, незважаючи на те, що всі параметри однакові для обох сортів. Далі існує симетрична фаза, в якій частинки присутні при однакових середніх густинах. Перехід із симетричної фази у фазу з порушеною симетрією може бути як першого роду, так і неперервним. Такі дві фази існують як на ґратці Бете, так і на ґратці Фушімі, і лише точне розташування критичних точок дещо відрізняється. Ми зрозуміли, що в цілому для тих же J та p симетрія на ґратці Фушімі порушується при менших значеннях хімічного потенціалу, ніж на ґратці Бете.

Також ми показали, що на ґратці Бете існують дві фази зі структурним впорядкуванням. В одній з них система спонтанно розділяється на дві підґратки, одна з яких зайнята обома сортами частинок, які присутні з однаковою середньою густиною, а друга підґратка у той час майже порожня. У другій фазі система знову розпадається на дві підґратки, одна з яких зайнята одним сортом частинок, а друга підґратка – іншим сортом. Система входить у першу фазу і виходить з неї через неперервний фазовий перехід, а також неперервно входить у другу фазу. Такі фази відсутні на ґратці Фушімі через більш сильні фрустраційні ефекти.

ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ ДИСЕРТАЦІЇ

У дисертаційній роботі було проведено дослідження впливу локальних флуктуацій реагуючих речовин та їх транспортних властивостей на зміну законів скейлінгу у реакційно-дифузійних системах. В іншій групі задач проведено дослідження впливу неоднорідних просторових властивостей каталізатора на рівноважну поведінку утворених адсорбатів, що формуються в процесі каталітично-активованих реакцій.

На основі проведених досліджень можна сформулювати основні висновки у вигляді наступних тверджень.

1. Пояснено зміну скейлінгу при переході між дифузійно-обмеженим та реакційно-обмеженим кооперативними режимами у реакційно-дифузійних системах. З цією метою порівняно універсальну поведінку односортового коагуляційно-дифузійного процесу на великих часах на одновимірному ланцюжку та ґратці Бете. Показано, що на ґратці Бете аналіз залежної від часу густини частинок із перетворенням Лапласа аналогічний дослідженню стаціонарного стану при додаванні стохастичного скидання до конфігурації нескорельованих частинок. У цьому стаціонарному стані вперше знайдено логарифмічні поправки до скейлінгу, а також вперше отримано кросоверні скейлінгові функції та відповідні ефективні критичні показники.
2. Вперше отримано показники часового загасання густини та кореляційної функції густина-густина частинок-мішеней у двосортній реакційно-дифузійній системі з частинками-пастками, що можуть коагулювати або взаємно анігілювати, а аномальна дифузія частинок моделюється польотами Леві. У рамках теоретико-польової ренормалізаційної групи встановлено,

що принаймні в однопетлевому наближенні ці показники пов'язані з аналогічними виразами для випадку звичайної дифузії, при заміні просторової вимірності на ефективну, подібно до того як це спостерігається для критичної поведінки систем із далекосяжними взаємодіями. Отримані аналітичні результати для показника загасання густини підтверджені методом комп'ютерного експерименту. Зокрема, показано, що ймовірність виживання частинок-мішеней в реакційно-дифузійному процесі з польотами Леві вища у порівнянні з випадком звичайної дифузії.

3. Вперше отримано точні результати для тиску та його термодинамічних похідних для адсорбату, що формується в процесі каталітично-активованих реакцій у двосортній системі на ланцюжках із каталітичними елементами (зв'язки та вузли), що розміщені випадково за сценарієм відпаленого чи замороженого безладу. Зокрема показано, що поведінка у випадку відпаленого безладу доволі сильно відрізняється, якщо ми розглядаємо каталізатор як множину каталітичних зв'язків або як множину каталітичних вузлів і різниця стає все більш виразною при проміжних концентраціях каталітичних елементів та для більших значень активності. Також показано, що між випадками відпаленого та замороженого безладів для кожної з моделей якісна різниця несуттєва, однак кількісно в моделі каталітичних вузлів різниця між випадками відпаленого та замороженого безладів більш виражена, ніж в моделі каталітичних зв'язків, особливо при проміжних концентраціях каталітичних елементів та високих значеннях активності.
4. Вперше отримано точні фазові діаграми для бінарних ґраткових газів на деревовидних ґратках Бете та Фушімі з каталітичними зв'язками, що розміщені випадково за сценарієм відпаленого безладу та взаємодіючими частинками одного й того ж сорту. Для обох ґраток спостерігаються переходи (як першого роду, так і неперервні) між двома фазами адсорбату: симетрична фаза, що відповідає випадку, коли частинки співіснують у системі з однаковими густинами та фаза зі спонтанно порушеною симетрією між частинками

різних сортів, в якій вони присутні з двома різними середніми густинами, незважаючи на те, що всі параметри однакові для обох сортів. Показано, що на ґратці Бете існують також дві фази зі структурним впорядкуванням, в яких система спонтанно розділяється на дві підґратки з різним покриттям частинками на кожній з них. Показано, що такі фази відсутні на ґратці Фушімі через більш сильні фрустраційні ефекти.

ПОДЯКИ

Автор висловлює щирю подяку своєму науковому керівнику Максиму Леонідовичу Дудці за підтримку, терпіння, безцінні розмови та досвід і постійну допомогу як в роботі над дисертацією, так і поза її межами.

Автор висловлює подяку всім співавторам, з якими виконувались включені у дисертаційну роботу дослідження, зокрема Вікторії Блавацькій, Олів'є Бенішу та Глебу Ошаніну, Ксав'є Дюранту та Мальте Генкелю. Дякую вам за допомогу та нові навички і знання.

Автор також дякує Юрію Васильовичу Головачу за цінні поради, підтримку та критичні зауваження щодо рукопису дисертації.

Також автор дякує колективу інституту фізики конденсованих систем, зокрема відділу статистичної теорії конденсованих систем та лабораторії статистичної фізики складних систем за дружню атмосферу та позитивні емоції.

Дякую також родині та друзям за всебічну підтримку.

Частина дисертаційної роботи виконувалась за підтримки стипендії Президента України для молодих вчених (2020 – 2022 рр.) та гранту НАН України в рамках наукових проєктів дослідницьких лабораторій/груп для молодих вчених НАН України (2022 р.)

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Täuber U. C. Critical Dynamics: A Field Theory Approach to Equilibrium and Non-Equilibrium Scaling Behavior. Cambridge University Press, Cambridge, 2014.
2. ben Avraham D., Havlin S. Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
3. Krapivsky P. L., Redner S., Ben-Naim E. A Kinetic View of Statistical Physics. Cambridge, Cambridge University Press, 2010.
4. Täuber U. C., Howard M., Vollmayr-Lee B. P. Applications of field-theoretic renormalization group methods to reaction–diffusion problems // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2005. Vol. 38. P. R79. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/38/17/R01>.
5. Rashevsky N. An approach to the mathematical biophysics of biological self-regulation and of cell polarity // *Bltn Mathcal Biology*. 1940. Vol. 2. P. 15. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02478028>.
6. Turing A. The chemical basis of morphogenesis (*reprinted from the Philosophical Transactions of the Royal Society (part B), Vol. 237, pp. 37–72 (1953)*) // *Bltn Mathcal Biology*. 1990. Vol. 52. P. 153. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02459572>.
7. Glandsdorff P., Prigogine I. Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations. J. Willey & Sons, New York, 1971.
8. Nicolis G., Prigogine I. Exploring Complexity an Introduction. W. H. Freeman and Company, New York, 1989.
9. Zaikin A., Zhabotinsky A. Concentration Wave Propagation in Two-dimensional Liquid-phase Self-oscillating System // *Nature*. 1970. Vol.

225. P. 235. Access mode: <https://www.nature.com/articles/225535b0#citeas>.
10. Experimental evidence of a sustained standing Turing-type nonequilibrium chemical pattern / Castets V., Dulos E., Boissonade J., and De Kepper P. // *Phys. Rev. Lett.* 1990. Vol. 64. P. 2953. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.64.2953>.
 11. Vanag V. K., Epstein I. R. Pattern formation mechanisms in reaction-diffusion systems // *Int. J. Dev. Biol.* 2009. Vol. 53. P. 673. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.56.2553>.
 12. Ziff R., Gulari E., Barshad Y. Kinetic Phase Transitions in an Irreversible Surface-Reaction Model // *Phys. Lett.* 1986. Vol. 56. P. 2553. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.56.2553>.
 13. Clément E., Leroux-Hugon P., Sander L. M. Exact results for a chemical reaction model // *Phys. Rev. Lett.* 1991. Vol. 67. P. 1661. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.67.1661>.
 14. Fluctuations and critical phenomena in catalytic *CO* oxidation on nanoscale *Pt* facets / Suchorski Y., Beben J., Imbihl R., James E. W., Liu D.-J., and Evans J. W. // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 63. P. 165417. Access mode: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.63.165417>.
 15. Influence of auto-organization and fluctuations on the kinetics of a monomer-monomer catalytic scheme / Argyrakis P., Burlatsky S. F., Clément E., and Oshanin G. // *Phys. Rev. E.* 2001. Vol. 63. P. 021110. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.63.021110>.
 16. Smoluchowski M. Drei Vortrage uber Diffusion, Brownsche Bewegung und Koagulation von Kolloidteilchen // *Phys. Z.* 1916. Vol. 17. P. 557–571, 585–599.
 17. Rice S. A. Diffusion-Limited Reactions / ed. by Bamford C. H., Tipper C. F. H., Compton R. G. Elsevier, New York, 1985. Vol. 25. P. 25.
 18. Berezhkovskii A. M., Makhnovskii Y. A., Suris R. A. Kinetics of diffusion-

- controlled reactions // *Chem. Phys.* 1989. Vol. 137. P. 41. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0301010489870910>.
19. Bramson M., Griffeath D. Clustering and Dispersion Rates for Some Interacting Particle Systems on \mathbb{Z} // *The Annals of Probability*. 1980. Vol. 8. P. 183. Access mode: <http://www.jstor.org/stable/2243265>.
 20. ben Avraham D., Burschka M., Doering C. R. Statics and dynamics of a diffusion-limited reaction: Anomalous kinetics, nonequilibrium self-ordering, and a dynamic transition // *J. Stat. Phys.* 1990. Vol. 60. P. 695. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007%2FBF01025990>.
 21. Henkel M., Orlandini E., Santos J. Reaction–Diffusion Processes from Equivalent Integrable Quantum Chains // *Ann. Phys. (NY)*. 1997. Vol. 259. P. 163. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0003491697957122>.
 22. Bares P.-A., Mobilia M. Diffusion-limited reactions of hard-core particles in one dimension // *Phys. Rev. E*. 1999. Vol. 59. P. 1996. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.59.1996>.
 23. Mobilia M., Bares P.-A. Exact solution of a class of one-dimensional nonequilibrium stochastic models // *Phys. Rev. E*. 2001. Vol. 63. P. 056112. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.63.056112>.
 24. Anomalous Diffusion: A Basic Mechanism for the Evolution of Inhomogeneous Systems / Olivera F. A., Ferreira R. M. S., Lapas L. C., and Vainstein M. H. // *Front. Phys.* 2019. Vol. 7. P. 18. Access mode: <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2019.00018/full>.
 25. Measurement of a Reaction-Diffusion Crossover in Exciton-Exciton Recombination inside Carbon Nanotubes Using Femtosecond Optical Absorption / Allam J., Sajjad M. T., Sutton R., Litvinenko K., Wang Z., Siddique S., Yang Q.-H., Loh W. H., and Brown T. // *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 111. P. 197401. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/>

- 10.1103/PhysRevLett.111.197401.
26. ben Avraham D., Glasser M. L. Diffusion-limited one-species reactions in the Bethe lattice // *J. Phys. Condens. Matter*. 2007. Vol. 19. P. 065107. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/19/6/065107>.
 27. Exact correlations in the one-dimensional coagulation–diffusion process investigated by the empty-interval method / Durang X., Fortin J.-Y., del Biondo D., Henkel M., and Richert J. // *J. Stat. Mech.* 2010. P. P04002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2010/04/P04002>.
 28. Durang X., Fortin J.-Y., Henkel M. Exact two-time correlation and response functions in the one-dimensional coagulation–diffusion process by the empty-interval method // *J. Stat. Mech.* 2011. P. P02030. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2011/02/P02030>.
 29. Durang X., Henkel M., Park H. The statistical mechanics of the coagulation–diffusion process with a stochastic reset // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2014. Vol. 47. P. 045002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/47/4/045002>.
 30. Anomalous dimension in a two-species reaction–diffusion system / Vollmayr-Lee B., Hanson J., McIsaac R., and Hellerick J. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2018. Vol. 51. P. 034002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/aa98cf/meta>.
 31. Oshanin G., Burlatsky S. F. Single-species reactions on a random catalytic chain // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2002. Vol. 35. P. L695. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/35/47/103>.
 32. Oshanin G., Popescu M. N., Dietrich S. Equilibrium properties of a monomer–monomer catalytic reaction on a one-dimensional chain // *Phys. Rev. E*. 2003. Vol. 68. P. 016109. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.68.016109>.
 33. Phase behaviour and structure of a superionic liquid in nonpolarized nanocon-

- finement / Dudka M., Kondrat S., Kornyshev A., and Oshanin G. // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2016. Vol. 28. P. 464007. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/28/46/464007>.
34. Dudka M., Bénichou O., Oshanin G. Order-disorder transitions in lattice gases with annealed reactive constraints // *J. Stat. Mech.* 2018. P. 043206. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/aab682>.
35. Crossover between diffusion-limited and reaction-limited regimes in the coagulation–diffusion process / Shapoval D., Dudka M., Durang X., and Henkel M. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2018. Vol. 51. P. 425002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/aadd53>.
36. Shapoval D., Blavatska V., Dudka M. Survival in two-species reaction-diffusion system with Lévy flights: Renormalization group treatment and numerical simulations // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2022. Vol. 55. P. 455002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ac9c39>.
37. Equilibrium properties of two-species reactive lattice gases on random catalytic chains / Shapoval D., Dudka M., Bénichou O., and Oshanin G. // *Phys. Rev. E*. 2020. Vol. 102. P. 032121. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.102.032121>.
38. Binary lattice-gases of particles with soft exclusion: exact phase diagrams for tree-like lattices / Shapoval D., Dudka M., Bénichou O., and Oshanin G. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2021. Vol. 54. P. 385003. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ac1c39>.
39. Kaprivsky P., Redner S., Ben-Naim E. A kinetic view of statistical physics. Cambridge University Press, Cambridge, 2010.
40. Kotomin E., Kuzovkov V. Modern Aspects of Diffusion-Controlled Reactions: Cooperative Phenomena in Bimolecular Processes. Elsevier, Amsterdam, 1996.
41. Schnoerr D., Grima R., Sanguinetti G. Cox process representation and inference for stochastic reaction–diffusion processes // *Nat Commun.* 2016. Vol. 7. P. 11729. Access mode: <https://www.nature.com/articles/ncomms11729>.

42. Doi M. Second quantization representation for classical many-particle system // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1976. Vol. 9. P. 1465. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/9/9/008/meta>.
43. Doi M. Stochastic theory of diffusion-controlled reaction // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1976. Vol. 9. P. 1479. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/9/9/009/meta>.
44. Henkel M., Hinrichsen H., Lübeck S. Non-Equilibrium Phase Transitions (Absorbing Phase Transitions vol 1). Springer, Heidelberg, 2008.
45. Ódor G. Universality in Nonequilibrium Lattice Systems: Theoretical Foundations. World Scientific, Singapore, 2008.
46. Toussaint D., Wilczek F. Particle–antiparticle annihilation in diffusive motion // *J. Chem. Phys.* 1983. Vol. 78. P. 2642. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.445022>.
47. Grima R., Schnell S. A systematic investigation of the rate laws valid in intracellular environments // *Biophys. Chem.* 2006. Vol. 124. P. 1. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0301462206001219>.
48. Takahashi K., Tanase-Nicola S., ten Wolde P. R. Spatio-temporal correlations can drastically change the response of a MAPK pathway // *Proc. Natl Acad. Sci. USA*. 2010. Vol. 107. P. 2473. Access mode: <https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.0906885107>.
49. Bicknell B. A., Dayan P., Goodhill G. J. The limits of chemosensation vary across dimensions // *Nat. Commun.* 2015. Vol. 6. P. 7468. Access mode: <https://www.nature.com/articles/ncomms8468?origin=ppub>.
50. Repelled from the wound, or randomly dispersed? Reverse migration behaviour of neutrophils characterized by dynamic modelling / Holmes G. R., Anderson S. R., Dixon G., Robertson A. L., Reyes-Aldasoro C. C., Billings S. A., Renshaw S. A., and Kadiramanathan V. // *J. R. Soc. Interface*. 2012. Vol. 9. P. 3229. Access mode: <https://royalsocietypublishing.org/doi/full/10.1098/rsif.2012.0542>.

51. A mathematical model of the London riots and their policing / Davies T. P., Fry H. M., Wilson A. G., and Bishop S. R. // *Sci. Rep.* 2013. Vol. 3. P. 1303. Access mode: <https://www.nature.com/articles/srep01303>.
52. Finite-size scaling studies of one-dimensional reaction-diffusion systems. Part I. Analytical results / Krebs K., Pfannmüller M., Wehefritz B., and Hinrichsen H. // *J. Stat. Phys.* 1995. Vol. 78. P. 1429. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007%2F978-1-4020-1801-3>.
53. H. S. Concentration for one and two-species one-dimensional reaction-diffusion systems // *J Phys A: Math Gen.* 1995. Vol. 28. P. 6585. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/28/23/013>.
54. Doering C. R., Ben-Avraham D. Diffusion-limited coagulation in the presence of particle input: exact results in one dimension // *Phys Rev Lett.* 1989. Vol. 62. P. 2563. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.62.2563>.
55. Hinrichsen H. Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states // *Advances in Physics.* 2000. Vol. 49. P. 815. Access mode: <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00018730050198152>.
56. Mikhailov A. S. Foundations of synergetics I. Springer Verlag, Berlin, 1994.
57. Prasad J., Kopelman R. Molecular reaction kinetics inside channel pores: Delayed fluorescence of naphthalene in methanol // *Chem. Phys. Lett.* 1989. Vol. 157. P. 535. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009261489874068?via%3Dihub>.
58. Kopelman R., Li C., Shi Z.-Y. One-dimensional exciton fusion kinetics in dilute polymer blends // *J. Lumin.* 1990. Vol. 45. P. 40. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/002223139090099W?via%3Dihub>.
59. Kroon R., Fleurent H., Sprik R. Diffusion-limited exciton fusion reaction in one-dimensional tetramethylammonium manganese trichloride (TMMC) // *Phys. Rev. E.* 1993. Vol. 47. P. 2462. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.47.2462>.

60. One-dimensional diffusion-limited relaxation of photoexcitations in suspensions of single-walled carbon nanotubes / Russo R., Mele E., Kane C., Rubtsov I., Therien M., and Luzzi D. // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 74. P. 041405(R). Access mode: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.74.041405>.
61. Srivastava A., Kono J. Diffusion-limited exciton-exciton annihilation in single-walled carbon nanotubes: A time-dependent analysis // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. P. 205407. Access mode: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.79.205407>.
62. Murakami Y., Kono J. Nonlinear Photoluminescence Excitation Spectroscopy of Carbon Nanotubes: Exploring the Upper Density Limit of One-Dimensional Excitons // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102. P. 037401. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.102.037401>.
63. Mattis D. C., Glasser M. L. The uses of quantum field theory in diffusion-limited reactions // *Rev. Mod. Phys.* 1998. Vol. 70. P. 979. Access mode: <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.70.979>.
64. Henkel M., Hinrichsen H., Lübeck S. Non-equilibrium phase transitions vol. 1: absorbing phase transitions. Springer, Heidelberg, 2008.
65. Evans M. R., Majumdar S. N. Diffusion with Stochastic Resetting // *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106. P. 160601. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.106.160601>.
66. Evans M. R., Majumdar S. N. Diffusion with optimal resetting // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2011. Vol. 44. P. 435001. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/44/43/435001>.
67. Evans M. R., Majumdar S. N., Mallick K. Optimal diffusive search: nonequilibrium resetting versus equilibrium dynamics // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2013. Vol. 46. P. 185001. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/46/18/185001/meta>.
68. Evans M. R., Majumdar S. N. Diffusion with resetting in arbitrary spatial dimension // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2014. Vol. 47. P. 285001. Access

- mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/47/28/285001>.
69. Evans M. R., Majumdar S. N., Schehr G. Stochastic resetting and applications // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2020. Vol. 53. P. 193001. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ab7cfe/meta>.
70. Experimental Realization of Diffusion with Stochastic Resetting / Tal-Friedman O., Pal A., Sekhon A., Reuveni S., and Roichman Y. // *J. Phys. Chem. Lett.* 2020. Vol. 11. P. 7350. Access mode: <https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.jpcllett.0c02122>.
71. Optimal mean first-passage time for a Brownian searcher subjected to resetting: Experimental and theoretical results / Besga B., Bovon A., Petrosyan A., Majumdar S. N., and Ciliberto S. // *Phys. Rev. Research.* 2020. Vol. 2. P. 032029(R). Access mode: <https://journals.aps.org/prresearch/abstract/10.1103/PhysRevResearch.2.032029>.
72. Klages R., Radons G., Sokolov I. Anomalous Transport: Foundations and Applications. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008.
73. Yuste S. B., Lindenberg K., Ruiz-Lorenzo J. J. Subdiffusion Limited Reactions / ed. by Klages R., Radons G., Sokolov I. M. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2008. P. 3.
74. Yuste S. B., Abad E., Lindenberg K. Reactions in Subdiffusive Media and Associated Fractional Equations / ed. by Bamford C. H., Tipper C. F. H., Compton R. G. Elsevier, New York, 2011. Vol. 25. P. 77.
75. Intermittent search strategies / Bénichou O., Loverdo C., Moreau M., and Voituriez R. // *Rev. Mod. Phys.* 2011. Vol. 83. P. 81. Access mode: <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.83.81>.
76. Lévy flights versus Lévy walks in bounded domains / Dybiec B., Gudowska-Nowak E., Barkai E., and Dubkov A. A. // *Phys. Rev. E.* 2017. Vol. 95. P. 05210. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.95.052102>.
77. First passage and first hitting times of Lévy flights and Lévy walks / Pa-

- lyulin V. V., Blackburn G., Lomholt M. A., Watkins N. W., Metzler R., Klages R., and Chechkin A. V. // *New J. Phys.* 2019. Vol. 21. P. 103028. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/ab41bb/meta>.
78. Shlesinger M. F., Zaslavsky G. M., Klafter J. Strange kinetics // *Nature*. 1993. Vol. 363. P. 31. Access mode: <https://www.nature.com/articles/363031a0>.
79. Shlesinger M., Zaslavsky G., Frisch U. Lévy Flights and Related Topics in Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1995.
80. Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // *Phys. Rep.* 2000. Vol. 339. P. 1. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0370157300000703>.
81. Zaslavsky G. M. Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport // *Phys. Rep.* 2002. Vol. 371. P. 461. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0370157302003319>.
82. Klafter J., Shlesinger M. F., Zumofen G. Beyond brownian motion // *Phys. Today*. 1996. Vol. 49. P. 33. Access mode: https://acoustique.ec-lyon.fr/chaos/Klafter_PhysicsToday96.pdf.
83. Zaburdaev V., Denisov S., Klafter J. Lévy walks // *Rev. Mod. Phys.* 2015. Vol. 87. P. 483. Access mode: <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.87.483>.
84. Geisel T., Nierwetberg J., Zacherl A. Accelerated Diffusion in Josephson Junctions and Related Chaotic Systems // *Phys. Rev. Lett.* 1985. Vol. 54. P. 616. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.54.616>.
85. Shlesinger M. F., Klafter J. Comment on “Accelerated Diffusion in Josephson Junctions and Related Chaotic Systems” // *Phys. Rev. Lett.* 1985. Vol. 54. P. 2551. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.54.2551>.

86. Anomalous transport of streamlines due to their chaos and their spatial topology / Chernikov A., Petrovichev B., Rogal'sky A., Sagdeev R., and Zaslavsky G. // *Phys. Lett. A*. 1990. Vol. 144. P. 127. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/037596019090687J>.
87. Chaikovsky D. K., Zaslavsky G. Channeling and percolation in two-dimensional chaotic dynamics // *Chaos*. 1991. Vol. 1. P. 463. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.165856>.
88. Shlesinger M. F., West B. J., Klafter J. Lévy dynamics of enhanced diffusion: Application to turbulence // *Phys. Rev. Lett.* 1987. Vol. 58. P. 1100. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.58.1100>.
89. Viccelli J. A. Dynamics of two-dimensional turbulence // *Phys. Fluids A*. 1990. Vol. 2. P. 2036. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.857678>.
90. Solomon T. H., Weeks E. R., Swinney H. L. Observation of anomalous diffusion and Lévy flights in a two-dimensional rotating flow // *Phys. Rev. Lett.* 1993. Vol. 71. P. 3975. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.71.3975>.
91. Anomalous diffusion in “living polymers”: A genuine Lévy flight? / Ott A., Bouchaud J. P., Langevin D., and Urbach W. // *Phys. Rev. Lett.* 1990. Vol. 65. P. 2201. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.65.2201>.
92. Facilitated diffusion with DNA coiling / Lomholt M. A., van den Broek B., Kalisch S.-M. J., Wuite G. J. L., and Metzler R. // *PNAS*. 2009. Vol. 106. P. 8204. Access mode: <https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.0903293106>.
93. Ancona M., Michieletto D., Marenduzzo D. Competition between local erasure and long-range spreading of a single biochemical mark leads to epigenetic bistability // *Phys. Rev. E*. 2020. Vol. 101. P. 042408. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.101.042408>.

94. Subrecoil laser cooling and Lévy flights / Bardou F., Bouchaud J. P., Emile O., Aspect A., and Cohen-Tannoudji C. // *Phys. Rev. Lett.* 1994. Vol. 72. P. 203. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.72.203>.
95. Sharma D., Ramachandran H., Kumar N. Lévy statistical fluctuations from a random amplifying medium // *Fluct. Noise Lett.* 2006. Vol. 6. P. L95. Access mode: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0219477506003185>.
96. Statistical regimes of random laser fluctuations / Lepri S., Cavalieri S., Oppo G.-L., and Wiersma D. S. // *Phys. Rev. A*. 2007. Vol. 75. P. 063820. Access mode: <https://journals.aps.org/pra/abstract/10.1103/PhysRevA.75.063820>.
97. Observation of Lévy distribution and replica symmetry breaking in random lasers from a single set of measurements / Gomes A. S. L., Raposo E. P., Moura A. L., Fewo S. I., Pincheira P. I. R., Jerez V., Maia L. J. Q., and de Araújo C. B. // *Sci. Rep.* 2016. Vol. 6. P. 27987. Access mode: <https://www.nature.com/articles/srep27987>.
98. Barthelemy P., Bertolotti J., Wiersma D. S. A Lévy flight for light // *Nature*. 2008. Vol. 453. P. 495. Access mode: <https://www.nature.com/articles/nature06948>.
99. Weak localization of light in superdiffusive random systems / Burreli M., Radhalakshmi V., Savo R., Bertolotti J., Vynck K., and Wiersma D. S. // *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 108. P. 110604. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.108.110604>.
100. Lévy flight search patterns of wandering albatrosses / Viswanathan G. M., Afanasyev V., Buldyrev S. V., Murphy E. J., Prince P. A., and Stanley H. E. // *Nature*. 1996. Vol. 381. P. 413. Access mode: <https://www.nature.com/articles/381413a0>.
101. Lévy strategies in intermittent search processes are advantageous / Lomholt M., Tal K., Metzler R., and Klafter J. // *Proc. Nat. Acad. Sci.*

- USA*. 2008. Vol. 105. P. 11055. Access mode: <https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.0803117105>.
102. Lévy flights and random searches / Raposo E. P., Buldyrev S. V., da Luz M. G. E., Viswanathan G. M., and Stanley H. E. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2009. Vol. 42. P. 434003. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/42/43/434003/meta>.
103. Roy S., Chaudhuri S. S. Cuckoo Search Algorithm using Lévy flights: A Review // *Int. J. Mod. Educ. Comput. Sci.* 2013. Vol. 5. P. 10. Access mode: <https://www.mecspress.org/ijmecs/ijmecs-v5-n12/IJMECS-V5-N12-2.pdf>.
104. Palyulin V. V., Chechkin A. V., Metzler R. Lévy flights do not always optimize random blind search for sparse targets // *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*. 2014. Vol. 111. P. 2931. Access mode: <https://www.pnas.org/doi/full/10.1073/pnas.1320424111>.
105. Hinrichsen H. Non-equilibrium phase transitions with long-range interactions // *J. Stat. Mech.* 2007. P. P07006. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2007/07/P07006/meta>.
106. Stanislavsky A., Weron K. Two-time scale subordination in physical processes with long-term memory // *Annals of Physics*. 2008. Vol. 323. P. 643. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0003491607000565>.
107. Fuchs J., Goldt S., Seifert U. Stochastic thermodynamics of resetting // *Europhys. Lett.* 2016. Vol. 113. P. 60009. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1209/0295-5075/113/60009>.
108. Falcao R., Evans M. Interacting Brownian motion with resetting // *J. Stat. Mech.* 2017. P. P023204. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/aa569c>.
109. Montero M., Masó-Puigdellosas A., Villaroel J. Continuous-time random walks with reset events // *Eur. Phys. J. B*. 2017. Vol. 90. P. 176. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1140%2Fepjb%2Fe2017-80348-4>.

110. Roldán É., Gupta S. Path-integral formalism for stochastic resetting: Exactly solved examples and shortcuts to confinement // *Phys. Rev. E*. 2017. Vol. 96. P. 022130. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.96.022130>.
111. First order transition for the optimal search time of Lévy flights with resetting / Kusmierz L., Majumdar S., Sabhapandit S., and Schehr G. // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 113. P. 220602. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.113.220602>.
112. Reuveni S. Optimal Stochastic Restart Renders Fluctuations in First Passage Times Universal // *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 116. P. 170601. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.116.170601>.
113. Pal A., Reuveni S. First Passage under Restart // *Phys. Rev. Lett.* 2017. Vol. 118. P. 030603. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.118.030603>.
114. Belan S. Restart Could Optimize the Probability of Success in a Bernoulli Trial // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 120. P. 080601. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.120.080601>.
115. Checkkin A., Sokolov I. Random Search with Resetting: A Unified Renewal Approach // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 121. P. 050601. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.121.050601>.
116. Mercado-Vasquez G., Boyer D. Search of stochastically gated targets with diffusive particles under resetting // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2021. Vol. 54. P. 444002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ac27e5/meta>.
117. Stanislavsky A. A., Weron A. Subdiffusive search with home returns via stochastic resetting: a subordination scheme approach // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2022. Vol. 55. P. 074004. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ac4a1c/meta>.
118. Cayci S., Eryilmaz A., Srikant R. Continuous-Time Multi-Armed Bandits with

- Controlled Restarts // (*arXiv:2007.00081*). 2020. Access mode: <https://arxiv.org/abs/2007.00081>.
119. Lorenz J. Restart Strategies in a Continuous Setting // *Theory Comput Syst.* 2021. Vol. 65. P. 1143. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/s00224-021-10041-0>.
120. Spectral properties of simple classical and quantum reset processes / Rose D. C., Touchette H., Lesanovsky I., and Garrahan J. P. // *Phys. Rev. E.* 2018. Vol. 98. P. 022129. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.98.022129>.
121. Wald S., Böttcher L. From classical to quantum walks with stochastic resetting on networks // *Phys. Rev. E.* 2021. Vol. 103. P. 012122. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.103.012122>.
122. Stochastic resetting in backtrack recovery by RNA polymerases / Roldán É., Lisica A., Sánchez-Taltavull D., and Grill S. W. // *Phys. Rev. E.* 2016. Vol. 93. P. 062411. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.93.062411>.
123. Mechanisms of backtrack recovery by RNA polymerases I and II / Lisica A., Engel C., Jahnel M., Roldán É., Galburt E. A., Cramer P., and Grill S. W. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2016. Vol. 113. P. 2946. Access mode: <https://www.pnas.org/doi/full/10.1073/pnas.1517011113>.
124. Kuśmierz Ł., Gudowska-Nowak E. Optimal first-arrival times in Lévy flights with resetting // *Phys. Rev. E.* 2015. Vol. 92. P. 052127. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.92.052127>.
125. Stanislavsky A. A., Weron A. Optimal non-Gaussian search with stochastic resetting // *Phys. Rev. E.* 2021. Vol. 104. P. 014125. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.104.014125>.
126. Majumdar S. N. Mounaix P., Sabhapandit S., Schehr G. Record statistics for random walks and Lévy flights with resetting // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2022. Vol. 55. P. 034002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ac3fc1>.

127. Geometric Brownian motion under stochastic resetting: A stationary yet non-ergodic process / Stojkoski V., Sandev T., Kocarev L., and Pal A. // *Phys. Rev. E*. 2021. Vol. 104. P. 014121. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.104.014121>.
128. da Silva T. T., Fragoso M. D. The interplay between population genetics and diffusion with stochastic resetting // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2018. Vol. 51. P. 505002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/aaea8f>.
129. da Silva T. T., Fragoso M. D. Diffusion with stochastic resetting of interacting particles emerging from a model of population genetics // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2022. Vol. 55. P. 014003. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ac3cdd/meta>.
130. Mercado-Vasquez G., Boyer D. Lotka-Volterra systems with stochastic resetting // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2018. Vol. 51. P. 405601. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/aadbc0>.
131. Plata C. A., Gupta D., Azaele S. Asymmetric stochastic resetting: Modeling catastrophic events // *Phys. Rev. E*. 2020. Vol. 102. P. 052116. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.102.052116>.
132. Magoni M., Majumdar S. N., Schehr G. Ising model with stochastic resetting // *Phys. Rev. Research*. 2020. Vol. 2. P. 033182. Access mode: <https://journals.aps.org/prresearch/abstract/10.1103/PhysRevResearch.2.033182>.
133. Basu U., Kundu A., Pal A. Symmetric exclusion process under stochastic resetting // *Phys. Rev. E*. 2019. Vol. 100. P. 032136. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.100.032136>.
134. Karthika S., Nagar A. Totally asymmetric simple exclusion process with resetting // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2020. Vol. 53. P. 115003. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ab6aef>.
135. Miron A., Reuveni S. Diffusion with local resetting and exclusion // *Phys. Rev.*

- Research*. 2021. Vol. 3. P. L012023. Access mode: <https://journals.aps.org/prresearch/abstract/10.1103/PhysRevResearch.3.L012023>.
136. Kotomin E., Kuzovkov V. Phenomenological kinetics of Frenkel defect recombination and accumulation in ionic solids // *Rep. Prog. Phys.* 1992. Vol. 55. P. 2079. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0034-4885/55/12/001/meta>.
137. Ovchinnikov A. A., Timashev S. F., Belyy A. Kinetics of Diffusion Controlled Chemical Process. Nova Science, New York, 1989.
138. Konkoli Z. Application of Bogolyubov's theory of weakly nonideal Bose gases to the $A + A$, $A + B$, $B + B$ reaction-diffusion system // *Phys. Rev E*. 2004. Vol. 69. P. 011106. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.69.011106>.
139. Krapivsky P. L., Ben-Naim E., Redner S. Kinetics of heterogeneous single-species annihilation // *Phys. Rev. E*. 1994. Vol. 50. P. 2474. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.50.2474>.
140. Hnatič M., Honkonen J., Lučivjanský T. Field-theoretic technique for irreversible reaction processes // *Phys.Part. Nuclei*. 2013. Vol. 44. P. 316. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1134/S1063779613020160>.
141. Howard M. Fluctuation kinetics in a multispecies reaction – diffusion system // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1996. Vol. 29. P. 3437. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/29/13/016/meta4>.
142. Rajesh R., Zaboronski O. Survival probability of a diffusing test particle in a system of coagulating and annihilating random walkers // *Phys. Rev. E*. 2004. Vol. 70. P. 036111. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.70.036111>.
143. Anomalous Steady-State Properties of Long-Range $A + A \rightarrow 0$ Reactions / Oshanin G., Burlatsky S., Clément E., Graff D. S., and Sander L. M. // *J. Phys. Chem.* 1994. Vol. 98. P. 7390. Access mode: <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/j100081a026>.

144. Krishnamurthy S., Rajesh R., Zaboronski O. Kang-Redner small-mass anomaly in cluster-cluster aggregation // *Phys. Rev. E*. 2002. Vol. 66. P. 066118. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.66.066118>.
145. Krishnamurthy S., Rajesh R., Zaboronski O. Persistence properties of a system of coagulating and annihilating random walkers // *Phys. Rev. E*. 2003. Vol. 68. P. 046103. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.68.046103>.
146. Suna A. Kinematics of Exciton-Exciton Annihilation in Molecular Crystals // *Phys. Rev. B*. 1970. Vol. 1. P. 1716. Access mode: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.1.1716>.
147. Kotomin E., Kuzovkov V. Some problems of recombination kinetics. I // *Chem. Phys.* 1983. Vol. 76. P. 479. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/030101048385229X>.
148. Kotomin E., Kuzovkov V. Some problems of recombination kinetics. II // *Chem. Phys.* 1983. Vol. 81. P. 335. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0301010483853270>.
149. Muthukumar M. Concentration dependence of diffusion controlled processes among static traps // *J. Chem. Phys.* 1982. Vol. 76. P. 2667. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.443249>.
150. Calef D. F., Deutch J. Diffusion and reversible reaction in a medium with penetrable sinks // *J. Chem. Phys.* 1983. Vol. 79. P. 203. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.445559>.
151. Peliti L. Path integral approach to birth-death processes on a lattice // *J. Phys. France*. 1985. Vol. 46. P. 1469. Access mode: https://jphys.journaldephysique.org/articles/jphys/abs/1985/09/jphys_1985__46_9_1469_0/jphys_1985__46_9_1469_0.html.
152. Peliti L. Renormalisation of fluctuation effects in the $A + A \rightarrow A$ reaction // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1986. Vol. 19. P. L365. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/19/6/012/meta>.

153. Lee B. P. Renormalization group calculation for the reaction $kA \rightarrow 0$ // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1994. Vol. 27. P. 2633. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/27/8/004/meta>.
154. Cardy J., Täuber U. Theory of Branching and Annihilating Random Walks // *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 77. P. 4780. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.77.4780>.
155. Cardy J., Täuber U. Field Theory of Branching and Annihilating Random Walks // *J. Stat. Phys.* 1998. Vol. 90. P. 1. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1023/A:1023233431588>.
156. Janssen H. K., Täuber U. C. The field theory approach to percolation processes // *Ann. Phys.* 2005. Vol. 315. P. 147. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0003491604001769>.
157. Lee B. P., Cardy J. Renormalization group study of the $A + B \rightarrow \emptyset$ diffusion-limited reaction // *J. Stat. Phys.* 1995. Vol. 80. P. 971. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02179861>.
158. Corrigendum: Anomalous dimension in a two-species reaction–diffusion system / Vollmayr-Lee B., Hanson J., McIsaac R., and Hellerick J. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2020. Vol. 53. P. 179501. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ab7780>.
159. Richardson M. J. E., Cardy J. The reaction process $A + A \rightarrow \emptyset$ in Sinai disorder // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1999. Vol. 32. P. 4035. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/32/22/304/meta>.
160. Park J.-M., Deem M. W. Disorder-induced anomalous kinetics in the $A + A \rightarrow \emptyset$ reaction // *Phys. Rev. E.* 1998. Vol. 57. P. 3618. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.57.3618>.
161. Deem M. W., Park J.-M. Reactive turbulent flow in low-dimensional, disordered media // *Phys. Rev. E.* 1998. Vol. 58. P. 3223. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.58.3223>.
162. Vernon D. C. Long range hops and the pair annihilation reaction $A + A \rightarrow 0$: Renormalization group and simulation // *Phys. Rev. E.* 2003. Vol. 68.

- P. 041103. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.68.041103>.
163. Vernon D. C., Howard M. Branching and annihilating Lévy flights // *Phys. Rev. E*. 2001. Vol. 63. P. 041116. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.63.041116>.
164. Hinrichsen H., Howard M. A model for anomalous directed percolation // *Eur. Phys. J. B*. 1999. Vol. 7. P. 635. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/s100510050656>.
165. Janssen H. K., Stenull O. Field theory of directed percolation with long-range spreading // *Phys. Rev. E*. 2008. Vol. 78. P. 061117. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.78.061117>.
166. Goncharenko I., Gopinathan A. Vicious Lévy Flights // *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 190601. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.105.190601>.
167. Bond G. C. Heterogeneous Catalysis: Principles and Applications. Clarendon Press, Oxford, 1987.
168. Davis M., Davis R. Fundamentals of Chemical Reaction Engineering. McGraw-Hill Chemical Engineering Series, McGraw-Hill, New York, 2003.
169. Liu D.-J., Evan J. W. Realistic multisite lattice-gas modeling and KMC simulation of catalytic surface reactions: Kinetics and multiscale spatial behavior for CO-oxidation on metal (100) surfaces // *Prog. Surf. Sci.* 2013. Vol. 88. P. 393. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079681613000361?via%3Dihub>.
170. Marro J., Dickman R. Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
171. Oshanin G., Blumen A. Kinetic description of diffusion-limited reactions in random catalytic media // *J. Chem. Phys.* 1998. Vol. 108. P. 1140. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.475476>.
172. Toxvaerd S. Molecular dynamics simulation of diffusion-limited catalytic reactions // *J. Chem. Phys.* 1998. Vol. 109. P. 8527. Access mode:

<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.477518>.

173. Influence of auto-organization and fluctuations on the kinetics of a monomer-monomer catalytic scheme / Argyrakis P., Burlatsky S., Clément E., and Oshanin G. // *Phys. Rev. E*. 2001. Vol. 63. P. 021110. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.63.021110>.
174. Catalytic reactions with bulk-mediated excursions: Mixing fails to restore chemical equilibrium / Coppey M., Bénichou O., Klafter J., Moreau M., and Oshanin G. // *Phys. Rev. E*. 2004. Vol. 69. P. 036115. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.69.036115>.
175. Oshanin G., Bénichou O., Blumen A. Exactly solvable model of $A + A \rightarrow 0$ reactions on a heterogeneous catalytic chain // *Europhys. Lett.* 2003. Vol. 62. P. 69. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1209/epl/i2003-00363-0>.
176. Oshanin G., Bénichou O., Blumen A. Exactly Solvable Model of Reactions on a Random Catalytic Chain // *J. Stat. Phys.* 2003. Vol. 112. P. 541. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1023%2FA%3A1023871824455>.
177. Oshanin G., Burlatsky S. F. Adsorption of reactive particles on a random catalytic chain: An exact solution // *Phys. Rev. E*. 2003. Vol. 67. P. 016115. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.67.016115>.
178. Oshanin G., Popescu M. N., Dietrich S. Exactly Solvable Model of Monomer-Monomer Reactions on a Two-Dimensional Random Catalytic Substrate // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 93. P. 020602. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.93.020602>.
179. Popescu M. N., Dietrich S., Oshanin G. Binary reactive adsorbate on a random catalytic substrate // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2007. Vol. 19. P. 065126. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/19/6/065126>.
180. Domb C. Some Theoretical Aspects of Melting // *Nuovo Cimento*. 1958.

- Vol. 9. P. 9. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02824224>.
181. Rushbrooke G., Scoins H. Cluster Sums for the Ising Model // *J. Math. Phys.* 1962. Vol. 3. P. 176. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1703776>.
182. Gaunt D., Fisher M. Hard-Sphere Lattice Gases. I. Plane-Square Lattice // *J. Chem. Phys.* 1965. Vol. 43. P. 2840. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1697217>.
183. Baxter R., Enting I., S.K. T. Hard-Sphere Lattice Gases. I. Plane-Square Lattice // *J. Stat. Phys.* 1980. Vol. 22. P. 465. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01012867>.
184. Poland D. On the universality of the non-phase transition singularity in hard-particle systems // *J. Stat. Phys.* 1984. Vol. 35. P. 341. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01014388>.
185. Guttmann A. J. Comment on “The exact location of partition function zeros, a new method for statistical mechanics” // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1987. Vol. 20. P. 511. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/20/2/037/meta>.
186. Lai S.-N., Fisher M. The universal repulsive-core singularity and Yang-Lee edge criticality // *J. Chem. Phys.* 1995. Vol. 103. P. 8144. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.470178>.
187. Todo S. Transfer-matrix study of negative fugacity singularity of hard-core lattice gas // *Int. J. Mod. Phys. C.* 1999. Vol. 10. P. 517. Access mode: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183199000401>.
188. Temperley H. An exactly soluble lattice model of the fluid-solid transition // *Proc. Phys. Soc.* 1965. Vol. 86. P. 185. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0370-1328/86/1/323>.
189. Burley D. A Lattice Model of a Classical Hard Sphere Gas // *Proc. Phys. Soc.* 1960. Vol. 75. P. 262. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0370-1328/75/2/313>.

190. Burley D. A Lattice Model of a Classical Hard Sphere Gas: II // *Proc. Phys. Soc.* 1961. Vol. 77. P. 451. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0370-1328/77/2/328>.
191. Runnels L. Phase transition of a Bethe lattice gas of hard molecules // *J. Math. Phys.* 1967. Vol. 8. P. 2081. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1705123>.
192. Baxter R. Hard hexagons: exact solution // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1980. Vol. 13. P. L61. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/13/3/007>.
193. Baxter R. J. Exactly solved models in statistical mechanics. Academic Press, London, 1982.
194. Bouttier J., Di Francesco P., Guitter E. Critical and tricritical hard objects on bicolourable random lattices: exact solutions // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2002. Vol. 35. P. 3821. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/35/17/302>.
195. Oliveira T., Stilck J. Solution on the Bethe lattice of a hard core athermal gas with two kinds of particles // *J. Chem. Phys.* 2011. Vol. 135. P. 184502. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3658045>.
196. Horiguchi T. A spin-one Ising model on a honeycomb lattice // *Phys. Lett. A.* 1986. Vol. 113. P. 425. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0375960186906651?via%3Dihub>.
197. Wu F. Y. On Horiguchi's solution of the Blume-Emery-Griffiths model // *Phys. Lett. A.* 1986. Vol. 116. P. 245. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0375960186901428?via%3Dihub>.
198. Ananikian N. S., Avakian A. R., Izmailian N. S. Phase diagrams and tricritical effects in the beg model // *Physica A.* 1991. Vol. 172. P. 391. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0378437191903910?via%3Dihub>.
199. Hu C.-K., Izmailian N. S. Exact correlation functions of Bethe lattice spin models in external magnetic fields // *Phys. Rev. E.* 1998. Vol. 58. P. 1644. Access mode: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.58.1644>.

- cess mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.58.1644>.
200. Vannimenus J. Modulated phase of an ising system with competing interactions on a Cayley tree // *Z. Physik B – Condensed Matter*. 1981. Vol. 43. P. 141. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01293605>.
 201. Potts models with invisible states on general Bethe lattices / Ananikian N., Izmailyan N., Johnston D., Kenna R., and Ranasinghe P. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2013. Vol. 46. P. 385002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/46/38/385002>.
 202. Glass models on Bethe lattices / Rivoire O., Biroli G., Martin O., and Mézard M. // *Eur. Phys. J. B*. 2004. Vol. 37. P. 55. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1140/epjb/e2004-00030-4>.
 203. De Luca A., Altshuler B.L. and Kravtsov V., Scardicchio A. Anderson Localization on the Bethe Lattice: Nonergodicity of Extended States // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 113. P. 046806. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.113.046806>.
 204. Superionic liquids in conducting nanoslits: A variety of phase transitions and ensuing charging behavior / Dudka M., Kondrat S., Bénichou O., Kornyshev A., and Oshanin G. // *J. Chem. Phys.* 2019. Vol. 151. P. 184105. Access mode: <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5127851>.
 205. Majumdar S. N., Privman V. Annihilation of immobile reactants on the Bethe lattice // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1993. Vol. 26. P. L743. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/26/16/006/meta>.
 206. Abad E. On-lattice coalescence and annihilation of immobile reactants in loopless lattices and beyond // *Phys. Rev. E*. 2004. Vol. 70. P. 031110. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.70.031110>.
 207. Exact correlation functions in particle-reaction models with immobile particles / Chatelain C., Henkel M., de Oliveira M. J., and Tomé T. // *J. Stat. Mech.*

2012. P. P11006. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2012/11/P11006>.
208. Henkel M., Seno F. Phase diagram of branched polymer collapse // *Phys. Rev. E*. 1996. Vol. 53. P. 3662. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.53.3662>.
209. de los Rios P., Lise S., Pelizzola A. Bethe approximation for self-interacting lattice trees // *Europhys. Lett.* 2001. Vol. 53. P. 176. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1209/epl/i2001-00133-6>.
210. Superionic liquids in conducting nanoslits: insights from theory and simulations / Groda Y., Dudka M., Kornyshev A., Oshanin G., and Kondrat S. // *J. Phys. Chem. C*. 2021. Vol. 125. P. 4968. Access mode: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.0c10836>.
211. Jurčišinová E., Jurčišin M. Geometric frustration effects in the spin-1 antiferromagnetic Ising model on the kagome-like recursive lattice: exact results // *J. Stat. Mech.* 2016. P. 093207. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2016/09/093207>.
212. Jabar E., Masrour R. Magnetic properties of simplest Husimi lattice: a Monte Carlo study // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2018. Vol. 31. P. 4185. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs10948-018-4705-9>.
213. Heisenberg antiferromagnet on the Husimi lattice / Liao H. J., Xie Z. Y., Chen J., Han X. J., Xie H. D., Normand B., and Xiang T. // *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93. P. 075154. Access mode: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.93.075154>.
214. Jurčišinová E., Jurčišin M., Bobák A. The Exact Solution of the Antiferromagnetic Ising Model with Multisite Interaction on the Simplest Pure Husimi Lattice // *J. Stat. Phys.* 2014. Vol. 154. P. 1096. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10955-013-0913-7>.
215. Ostilli M. Cayley Trees and Bethe Lattices: A concise analysis for mathematicians and physicists // *Physica A*. 2012. Vol. 391. P. 3417. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/>

S0378437112000647?via%3Dihub.

216. Rozikov U. A. A Contour Method on Cayley Trees // *J. Stat. Phys.* 2008. Vol. 130. P. 801. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.96.022130>.
217. Turban L. s -State Potts model on a Cayley tree // *Phys. Lett. A*. 1980. Vol. 78. P. 404. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0375960180904089?via%3Dihub>.
218. Iglói F., Turban L. Aperiodic Ising model on the Bethe lattice: Exact results // *Phys. Rev. E*. 2008. Vol. 78. P. 031128. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.78.031128>.
219. Matin L. F., Aghamohammadi A., Khorrami M. Exactly solvable reaction diffusion models on a Cayley tree // *Eur. Phys. J. B*. 2007. Vol. 56. P. 243. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1140/2Fepjb%2Fe2007-00103-x>.
220. Alimohammadi M., Olanj N. A class of solvable reaction–diffusion processes on a Cayley tree // *Physica A*. 2010. Vol. 389. P. 1549. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378437109010590?via%3Dihub>.
221. Khorrami M., Aghamohammadi A. Autonomous models on a Cayley tree // *J. Stat. Mech.* 2014. P. P07017. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/36/2/304>.
222. Matin L. F. Exactly solvable reaction diffusion models on a Bethe Lattice through the empty-interval method // *J. Theor. Appl. Phys.* 2015. Vol. 9. P. 93. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs40094-015-0163-y>.
223. Turban L., Fortin J.-Y. Reaction–diffusion on the fully-connected lattice: $A + A \rightarrow A$ // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2018. Vol. 51. P. 145001. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/aab0f4>.
224. Cadilhe A., Privman V. Random sequential adsorption of mixture of dimers and monomers on a pre-treated Bethe lattice // *Mod. Phys. Lett. B*. 2004.

- Vol. 18. P. 207. Access mode: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217984904006846>.
225. Cadilhe A., Araújo N. A. M., Privman V. Random sequential adsorption: from continuum to lattice and pre-patterned substrates // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2007. Vol. 19. P. 065124. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/19/6/065124>.
226. Cooperative sequential adsorption models on a Cayley tree: analytical results and applications / Mazilu D. A., Mazilu I., Seredinski A. M., Kim V. O., Simpson B. M., and Banks W. E. // *J. Stat. Mech.* 2012. P. P09002. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2012/09/P09002>.
227. Rácz Z. Diffusion-controlled annihilation in the presence of particle sources: Exact results in one dimension // *Phys. Rev. Lett.* 1985. Vol. 55. P. 1707. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.55.1707>.
228. Spouge J. L. Exact solutions for a diffusion-reaction process in one dimension // *Phys. Rev. Lett.* 1988. Vol. 60. P. 871. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.60.871>.
229. Spouge J. L. Exact solutions for a diffusion-reaction process in one dimension (erratum) // *Phys. Rev. Lett.* 1988. Vol. 60. P. 1885. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.60.1885.4>.
230. Dahmen S. R. Reaction-diffusion processes described by three-state quantum chains and integrability // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1995. Vol. 28. P. 905. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/28/4/016>.
231. Rey P.-A., Droz M. A renormalization group study of a class of reaction-diffusion models, with particles input // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1997. Vol. 30. P. 1101. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/30/4/013>.
232. Masser T., ben Avraham D. Kinetics of coalescence, annihilation, and the

- q -state Potts model in one dimension // *Phys. Lett. A*. 2000. Vol. 275. P. 382. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0375960100006228?via%3Dihub>.
233. Abad E., Frisch H. L., Nicolis G. One-Dimensional Lattice Dynamics of the Diffusion-Limited Reaction $A + A \rightarrow A + S$: Transient Behavior // *J. Stat. Phys.* 2000. Vol. 99. P. 1397. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1023%2FA%3A1018649108442>.
234. Henkel M., Hinrichsen H. Exact solution of a reaction-diffusion process with three-site interactions // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2001. Vol. 34. P. 1561. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/34/8/303>.
235. Yuste S. B., Lindenberg K. Subdiffusion-Limited $A + A$ Reactions // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 87. P. 118301. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.87.118301>.
236. Yuste S. B., Lindenberg K. Subdiffusion-limited reactions // *Chem. Phys.* 2002. Vol. 284. P. 169. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0301010402005463?via%3Dihub>.
237. Abad E., Masser T., ben Avraham D. Lattice kinetics of diffusion-limited coalescence and annihilation with sources // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2002. Vol. 35. P. 1483. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/35/7/301>.
238. Khorrami M., Aghamohammadi A., Alimohammadi M. Exactly solvable models through the empty interval method, for more-than-two-site interactions // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2003. Vol. 36. P. 345. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/36/2/304>.
239. Aghamohammadi A., Khorrami M. Models solvable through the empty-interval method // *Eur. Phys. J. B*. 2005. Vol. 47. P. 583. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1140%2Fepjb%2Fe2005-00358-1>.
240. Multi-Scaling of the n -Point Density Function for Coalescing Brownian Motions / Munasinghe R., Rajesh R., Tribe R., and Zaboronski O. // *Comm.*

- Math. Phys.* 2006. Vol. 268. P. 717. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00220-006-0110-5>.
241. Munasinghe R., Rajesh R., Zaboronski O. Multiscaling of correlation functions in single species reaction-diffusion systems // *Phys. Rev. E.* 2006. Vol. 73. P. 051103. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00220-006-0110-5>.
242. Fortin J.-Y. Crossover properties of a one-dimensional reaction-diffusion process with a transport current // *J. Stat. Mech.* 2014. P. P09033. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2014/09/P09033>.
243. Fortin J.-Y. Modified stochastic fragmentation of an interval as an ageing process // *J. Stat. Mech.* 2018. P. 023210. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/aaac49>.
244. Encounter-controlled coalescence and annihilation on a one-dimensional growing domain / Le Vot F., Escudero C., Abad E., and Yuste S. // *Phys. Rev. E.* 2018. Vol. 98. P. 032137. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.98.032137>.
245. Stochastic resetting in backtrack recovery by RNA polymerases / Roldán É., Lisica A., Sánchez-Taltavull D., and Grill S. // *Phys. Rev. E.* 2016. Vol. 93. P. 062411. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.93.062411>.
246. Lübeck S. Universal scaling behavior of non-equilibrium phase transitions // *Int. J. Mod. Phys. B.* 2004. Vol. 18. P. 3977. Access mode: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979204027748>.
247. Abramowitz M., Stegun I. Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. Dover Publications, New York, 1965.
248. Prudnikov A., Brychkov Y., Marichev O. Integrals and series, vol. 4: direct Laplace transforms. Gordon & Breach, New York, 1992.
249. Prudnikov A., Brychkov Y., Marichev O. Integrals and series, vol. 1: elementary functions. Gordon & Breach, New York, 1986.

250. Feller W. An introduction to probability theory and its applications. 1971. Vol. vol. 2, 2nd ed.
251. Prudnikov A. P., Brychkov Y., Marichev O. Integrals and series, vol. 5: inverse Laplace transforms. Gordon & Breach, New York, 1992.
252. Birnsteinová S., Hnatic M., Lucivjanský T. Two-Species Reaction-Diffusion System: the Effect of Long-Range Spreading // *EPJ Web Conf.* 2020. Vol. 226. P. 02005. Access mode: https://www.epj-conferences.org/articles/epjconf/abs/2020/02/epjconf_mmcp2019_02005/epjconf_mmcp2019_02005.html.
253. Birnsteinová S., Hnatic M., Lucivjanský T. Effect of Long-Range Spreading on Two-Species Reaction-Diffusion System / ed. by Skiadas C., Dimotikalis Y. Springer Proceedings in Complexity, Springer Cham, 2020. P. 45.
254. Mantegna R. N., Stanley H. E. Stochastic Process with Ultraslow Convergence to a Gaussian: The Truncated Lévy Flight // *Phys. Rev. Lett.* 1994. Vol. 73. P. 2946. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.73.2946>.
255. Ghaemia M., Zabihinpour Z., Asgari Y. Computer simulation study of the Lévy flight process // *Physica A.* 2009. Vol. 388. P. 1509. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378437108010947>.
256. Criticality of spin systems with weak long-range interactions / Defenu N., Codello A., Ruffo S., and Trombettoni A. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2020. Vol. 53. P. 143001. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ab6a6c/meta>.
257. Long-range multi-scalar models at three loops / Benedetti D., Gurau R., Harribey S., and Suzuki K. // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2020. Vol. 53. P. 445008. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/abb6ae/meta>.
258. Blume M., Emery V. J., Griffiths R. B. Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in He³ - He⁴ Mixtures // *Phys. Rev. A.* 1971. Vol. 4. P. 1071. Access mode: <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/>

- [PhysRevA.4.1071](#).
259. Mukamel D., Blume M. Ising model for tricritical points in ternary mixtures // *Phys. Rev. A*. 1974. Vol. 10. P. 610. Access mode: <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.10.610>.
260. Ensemble inequivalence in the Blume-Emery-Griffiths model near a fourth-order critical point / Prasad V. V., Campa A., Mukamel D., and Ruffo S. // *Phys. Rev. E*. 2019. Vol. 100. P. 052135. Access mode: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.100.052135>.
261. Harary F., Uhlenbeck G. On the number of Husimi trees // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 1953. Vol. 39. P. 315. Access mode: <https://www.pnas.org/content/39/4/315>.
262. Pretti M. A note on cactus trees: Variational vs. recursive approaches // *J. Stat. Phys.* 2003. Vol. 111. P. 993. Access mode: <https://link.springer.com/article/10.1023/A:1022862618478>.
263. Ananikian N., Izmailian N., Oganessyan K. An Ising spin- S model on generalized recursive lattice // *Physica A*. 1998. Vol. 254. P. 207. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378437198000132?via%3Dihub>.
264. Gujrati P. Bethe or Bethe-like Lattice Calculations Are More Reliable Than Conventional Mean-Field Calculations // *Phys. Rev. Lett.* 1995. Vol. 74. P. 809. Access mode: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.74.809>.
265. Monroe J. Frustrated Ising systems on Husimi trees // *Physica A*. 1998. Vol. 256. P. 217. Access mode: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0378437198002167?via%3Dihub>.
266. Huang R., Chen C. Thermodynamic transition of antiferromagnetic Ising model on the fractional multi-branched Husimi recursive lattice // *Commun Theor. Phys.* 2014. Vol. 62. P. 749. Access mode: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0253-6102/62/5/19>.
267. Furmane D., Dattagupta S., Griffiths R. B. Global phase diagram for a three-

- component model // *Phys. Rev. B*. 1977. Vol. 15. P. 441. Access mode: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.15.441>.
268. Vibration Frequency Spectra of Disordered Lattices. II. Spectra of Disordered One-Dimensional Lattices / Domb C., Maradudin A. A., Montroll E. W., and H. W. G. // *Phys. Rev.* 1959. Vol. 115. P. 24. Access mode: <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.115.24>.
269. Comprehensive Chemical Kinetics / ed. by Bamford C. H., Tipper C. F. H., Compton R. G. Elsevier, New York, 1985. Vol. 25.

ДОДАТОК А

ДЕТАЛІ ДЕЯКИХ ВИВЕДЕНЬ ТА ОБЧИСЛЕНЬ ДЛЯ ОДНОВИМІРНИХ ЛАНЦЮЖКІВ

А.1. Модель І: Каталітичні зв'язки

Відпалений безлад. Тиск, густина та стисливість

Тут ми розглядаємо асимптотичну поведінку середньої густини $n_A^{(ann)} = \frac{\partial P_I}{\partial \mu_A}$ [де тиск P_I задається формулою (4.21)] та стисливості $\kappa_A^{(I)} = \frac{1}{(n_A^{(k)})^2} \frac{\partial n_A}{\partial \mu_A}$ при малих значеннях активності z_A та z_B для моделі каталітичних зв'язків у випадку відпаленого безладу. Спочатку розглянемо випадок, коли одна з двох активностей є малою. Тоді, коли $z_A \ll 1$, для фіксованої активності z_B ми отримаємо

$$n_A^{(ann)} = \frac{(1+(1-p)z_B)^2}{(1+z_B)^3} z_A - \frac{(1+(1-p)z_B)^2 [(3p^2-6p+1)z_B^2 - 2(p^2+3p-1)z_B + 1]}{(1+z_B)^6} z_A^2 + \mathcal{O}(z_A^3), \quad (\text{A.1})$$

а стисливість матиме наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \kappa_A^{(ann)} &= \frac{(1+z_B)^3}{[1+(1-p)z_B]^2 z_A} \\ &+ \frac{p[p^3(z_B^2-3z_B-1)z_B - 2p^2(2z_B^2-z_B-3)z_B + p(6z_B-5)(1+z_B)^2 - 4(1+z_B)]z_B}{(1+z_B)^3 [1+(1-p)z_B]^2} z_A \\ &+ \mathcal{O}(z_A^{3/2}). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

У випадку, коли активність $z_B \ll 1$, у той час як z_A є фіксованим, ми знаходимо

$$n_A^{(ann)} = \frac{z_A}{1+z_A} - \frac{[p^2(z_A-2)z_A - 2p(z_A^2-1) + (1+z_A)]z_A}{(1+z_A)^4} z_B$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{4p^3(3z_A^3 - 3z_A^2 - 5z_A + 1)z_A - p^2(16z_A^2 - 19z_A + 1)(1+z_A)^2}{(1+z_A)^7} z_A z_B^2 \\
& + \frac{4p(2z_A - 1)(1+z_A)^3 - 3p^4(z_A^2 - 3z_A + 1)z_A^2 - (1+z_A)^4}{(1+z_A)^7} z_A z_B^2 + \mathcal{O}(z_B^{5/2}), \tag{A.3}
\end{aligned}$$

а стисливість задається як

$$\kappa_A^{(ann)} = \frac{1}{z_A} + \frac{p^2(z_A - 5)z_A^2 - 2p(z_A^3 - z_A^2 - 3z_A - 1) + (1+z_A)^3}{z_A(1+z_A)^3} z_B + \mathcal{O}(z_B^{3/2}). \tag{A.4}$$

Далі ми розглянемо дещо складніший випадок, коли одна або обидві активності є великими. Почнемо з аналізу асимптотичної поведінки t_2 (найменшого додатнього кореня), який означений у рівнянні (4.17). Припустимо, що активність $z_A \gg 1$, а z_B є фіксованим. Використовуючи тотожності

$$\sin \left[\frac{1}{3} \arcsin \left(\frac{\sqrt{z_B}(2-p)(9+2z_B(2-p)^2)}{2(3+z_B(2-p)^2)^{3/2}} \right) \right] = \frac{2-p}{2} \sqrt{\frac{z_B}{3+z_B(2-p)^2}}$$

та

$$\cos \left[\frac{1}{3} \arcsin \left(\frac{\sqrt{z_B}(2-p)(9+2z_B(2-p)^2)}{2(3+z_B(2-p)^2)^{3/2}} \right) \right] = \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{\frac{4+z_B(2-p)^2}{3+z_B(2-p)^2}}, \tag{A.5}$$

знаходимо, що t_2 матиме наступне асимптотичне представлення

$$\begin{aligned}
t_2 &= \frac{1}{z_A} - [1 + (1-p)^2 z_B] \frac{1}{z_A^2} + [1 + 2(1-3p+2p^2)z_B + (1-p)^2(1-4p+2p^2)z_B^2] \frac{1}{z_A^3} \\
&+ \mathcal{O}\left(\frac{1}{z_A^4}\right). \tag{A.6}
\end{aligned}$$

Таким чином, тиск у рівнянні (4.21) матиме таку асимптотику

$$\begin{aligned}
\beta P^{(ann)} &= \ln(z_A) + [1 + (1-p)^2 z_B] \frac{1}{z_A} \\
&- \frac{1}{2} [1 + 2(1-4p+3p^2)z_B + (1-p)^2(1-6p+3p^2)z_B^2] \frac{1}{z_A^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z_A^3}\right). \tag{A.7}
\end{aligned}$$

Як наслідок, усереднена за безладом густина частинок $n_A^{(ann)}$ задається як

$$n_A^{(ann)} = 1 - [1 + (1-p)^2 z_B] \frac{1}{z_A}$$

$$+ [1 + 2(1 - 4p + 3p^2)z_B + (1 - p)^2(1 - 6p + 3p^2)z_B^2] \frac{1}{z_A^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z_A^3}\right), \quad (\text{A.8})$$

у той час як стисливість у цій границі отримується у вигляді

$$\begin{aligned} \varkappa_A^{(ann)} &= [1 + (1 - p)^2 z_B] \frac{1}{z_A} \\ &- 2 [2(1 - 4p + 3p^2)z_B + (1 - p)^2(1 - 6p + 3p^2)z_B^2] \frac{1}{z_A^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z_A^3}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

У границі великих активностей $z_B \gg 1$ із фіксованим z_A , ми можемо переписати рівняння (4.17) як

$$\begin{aligned} t_2 &= \frac{1}{z_B} - [1 + (1 - p)^2 z_A] \frac{1}{z_B^2} + [1 + 2(1 - 3p + 2p^2)z_A + (1 - p)^2(1 - 4p + 2p^2)z_A^2] \frac{1}{z_B^3} \\ &+ \mathcal{O}\left(\frac{1}{z_B^4}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Це означає, що усереднена за безладом густина частинок A матиме вигляд

$$n_A^{(ann)} = (1 - p)^2 \frac{z_A}{z_B} - (1 - 4p + 3p^2) \frac{z_A}{z_B^2} + (1 - p)^2(1 - 6p + 3p^2) \frac{z_A^2}{z_B^3} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z_B^3}\right), \quad (\text{A.11})$$

в той час як стисливість демонструє наступну поведінку:

$$\varkappa_A^{(ann)} = \frac{1}{(1 - p)^2} \frac{z_B}{z_A} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{z_B}\right). \quad (\text{A.12})$$

Заморожений безлад. Відображення моделі I на спін-1 модель

Ми описуємо тут основні етапи нашого другого підходу, який полягає у відображенні гамільтоніану, який пов'язаний з великою канонічною статистичною сумою моделі I, на гамільтоніан класичної спін-1 моделі Блюме-Емері-Ґріффітса (Blume-Emery-Griffiths, BEG) [193, 258]. Це відображення на модель BEG виконується наступним чином. Кожному вузлу i , ($i = 1, \dots, N$) скінченного одновимірного ланцюжка присвоюється тристанова змінна σ_i , так що

$$\sigma_i = \begin{cases} +1, & \text{якщо вузол } i \text{ зайнятий частинкою } A, \\ -1, & \text{якщо вузол } i \text{ зайнятий частинкою } B, \\ 0, & \text{якщо вузол } i \text{ є вакантним.} \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

Булеві змінні n_i та m_i записуємо у термінах цієї тристанової змінної σ_i як

$$n_i = \frac{\sigma_i + \sigma_i^2}{2} \quad \text{та} \quad m_i = \frac{-\sigma_i + \sigma_i^2}{2}. \quad (\text{A.14})$$

Щоб трохи спростити виведення, ми також накладаємо граничні умови $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

Далі визначимо константи зв'язку між найближчими сусідніми вузлами

$$J_{i,j} = \begin{cases} -E_1 (E_1 \rightarrow 0), & \text{для сусідів } A - A, \\ -E_2 (E_2 \rightarrow 0), & \text{для сусідів } B - B, \\ +\zeta_i E_3 (E_3 \rightarrow \infty), & \text{для сусідів } A - B \text{ або } B - A, \\ 0, & \text{у іншому випадку,} \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

де в дужках вказується граничне значення відповідних констант зв'язку.

Отже, гамільтоніан моделі I можна записати як

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle}^N [n_i n_j (-E_1) + m_i m_j (-E_2) + \zeta_i (n_i m_j + n_j m_i) E_3] - \sum_{i=1}^N (\mu_A n_i + \mu_B m_i), \quad (\text{A.16})$$

де підсумовування у першому доданку відбувається за всіма парами найближчих сусідніх вузлів, причому кожна пара враховується тільки один раз. Гамільтоніан (A.16) можна переписати, використовуючи змінну σ_i , щоб отримати наступний вираз

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{E_1 + E_2 + 2\zeta_i E_3}{4} \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{E_1 + E_2 - 2\zeta_i E_3}{4} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 \sigma_{i+1}^2 \\ & - \frac{E_1 - E_2}{4} \sum_{i=1}^N (\sigma_i \sigma_{i+1}^2 + \sigma_{i+1} \sigma_i^2) - \frac{\mu_A - \mu_B}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i - \frac{\mu_A + \mu_B}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2. \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Далі стає зрозуміло, що це в точності гамільтоніан спінової $S = 1$ моделі [267] з наступними параметрами:

$$\begin{aligned} J &= \frac{E_1 + E_2 + 2\zeta_i E_3}{4}, \quad K = \frac{E_1 + E_2 - 2\zeta_i E_3}{4}, \quad C = \frac{E_1 - E_2}{4}, \\ H &= \frac{\mu_A - \mu_B}{2}, \quad \text{та} \quad \Delta = -\frac{\mu_A + \mu_B}{2}. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Відзначаючи еквівалентність нашої моделі та моделі BEG, ми бачимо, що значення параметрів, що з'являються у ефективній моделі BEG, трохи незвичні. Наші

умови $E_1 = E_2 = 0$ та $E_3 \rightarrow \infty$ дають, що $C = 0$, білінійна обмінна константа $J = \zeta_i E_3 / 2 \rightarrow \infty$ (якщо $\zeta_i = 1$), і, нарешті, біквдратична обмінна константа $K = -\zeta_i E_3 / 2 \rightarrow -\infty$, тоді відношенням J/K має бути постійний та рівним -1 незалежно від значення ζ_i .

Переозначивши далі локальні поля $\mu(\sigma_i)$, так що

$$\mu(\sigma_i) = \begin{cases} -\mu_A, & \text{якщо } \sigma_i = 1, \\ +\mu_B, & \text{якщо } \sigma_i = -1, \\ 0, & \text{якщо } \sigma_i = 0, \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

ми перепишемо велику канонічну статистичну суму у наступній формі

$$Z_N^{(BEG)} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{i=1}^N (-\beta J_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} - \beta \mu(\sigma_i) \sigma_i) \right], \quad (\text{A.20})$$

яку тепер зручно записати як слід добутку трансфер-матриць:

$$Z_N^{(BEG)} = \text{Tr} \prod_{i=1}^N V_{i,i+1}, \quad (\text{A.21})$$

з $V_{i,i+1}$, яка задається точно як

$$V_{i,i+1} = \exp [-\beta J_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} - \beta (\mu(\sigma_i) \sigma_i + \mu(\sigma_{i+1}) \sigma_{i+1}) / 2]. \quad (\text{A.22})$$

В термодинамічній границі вираз для тиску, що задається великою канонічною статистичною сумою моделі I та (A.21), стають ідентичними, якщо ми покладемо $E_1 = E_2 = 0$ та $E_3 \rightarrow \infty$. При таких значеннях параметрів трансфер-матриця $V_{i,i+1}$ приймає наступний вигляд

$$V_{i,i+1} = \begin{pmatrix} z_A & \sqrt{z_A} & (1 - \zeta_i) \sqrt{z_A z_B} \\ \sqrt{z_A} & 1 & \sqrt{z_B} \\ (1 - \zeta_i) \sqrt{z_A z_B} & \sqrt{z_B} & z_B \end{pmatrix}. \quad (\text{A.23})$$

Введемо такі позначення: $\sqrt{z_A} = x$, $\sqrt{z_B} = y$ та $1 - \zeta_i = \epsilon_i$. Тоді трансфер-матрицю $V_{i,i+1}$ (A.23) можна просто записати як

$$V_{i,i+1} \equiv V_{\epsilon_i} = \begin{pmatrix} x^2 & x & xy\epsilon_i \\ x & 1 & y \\ xy\epsilon_i & y & y^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.24})$$

де x та y – дійсні та додатньо визначені, а випадкова змінна ϵ_i :

$$\epsilon_i = \begin{cases} 0, & \text{з імовірністю } p, \\ 1, & \text{з імовірністю } 1 - p \equiv q. \end{cases} \quad (\text{A.25})$$

Як наслідок, кожна V_{ϵ_i} (A.24) дорівнює або

$$V_0 = \begin{pmatrix} x^2 & x & 0 \\ x & 1 & y \\ 0 & y & y^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.26})$$

з імовірністю p , або

$$V_1 = \begin{pmatrix} x^2 & x & xy \\ x & 1 & y \\ xy & y & y^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.27})$$

з імовірністю $q = 1 - p$. Матриці V_{ϵ_i} – дійсні та симетричні і мають невід’ємні елементи.

Розрахунок усередненого за безладом тиску в моделі I, таким чином, зводиться до знаходження показника Ляпунова γ ,

$$\gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \text{Tr} \prod_{i=1}^N V_{\epsilon_i}, \quad (\text{A.28})$$

добутку випадкових, нескорельованих 3×3 матриць вигляду (A.24). У даному випадку особливістю моделі є те, що матриця V_1 має ранг 1. Власне, саме ця обставина дозволяє точно обчислити показник Ляпунова.

Матриця V_1 має тільки одне ненульове власне значення, яке рівне $1 + x^2 + y^2$, у той час як два інших рівні 0, а власний вектор, що відповідає ненульовому власному значенню запишеться у вигляді

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} x \\ 1 \\ y \end{pmatrix}. \quad (\text{A.29})$$

Іншими словами V_1 є кратною ортогональному проектору на напрямок вектора \vec{u} . Крім того, ядро матриці V_1 є підпростором ортогональним до вектора \vec{u} . Його можна визначити, наприклад, наступними двома векторами \vec{v} та \vec{w} :

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{та} \quad \vec{w} = \begin{pmatrix} 0 \\ -y \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.30})$$

Введемо матрицю P таку, що

$$P = (\vec{u} \ \vec{v} \ \vec{w}) = \begin{pmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & -x & -y \\ y & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.31})$$

тоді обернена:

$$P^{-1} = \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} x & 1 & y \\ 1 + y^2 & -x & -xy \\ -xy & -y & 1 + x^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.32})$$

де

$$\lambda = 1 + x^2 + y^2. \quad (\text{A.33})$$

У базисі $\{\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}\}$, матриці V_1 та V_0 матимуть відповідно

$$W_1 = P^{-1}V_1P = \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.34})$$

та

$$\begin{aligned} W_0 &= P^{-1}V_0P \\ &= \frac{1}{\lambda} \begin{pmatrix} 1 + 2(x^2 + y^2) + x^4 + y^4 & -xy^2 & -x^2y \\ -xy^2(1 - x^2 + y^2) & x^2y^2 & -xy(1 + y^2) \\ -x^2y(1 + x^2 - y^2) & -xy(1 + x^2) & x^2y^2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Визначимо далі послідовність векторів

$$A_i = \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \\ c_i \end{pmatrix}, \quad (\text{A.36})$$

так що

$$A_i = W_{\epsilon_i} A_{i-1}, \quad (\text{A.37})$$

з

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.38})$$

Елементи a_i є додатніми. Як наслідок, показник Ляпунова γ у рівнянні (A.28) приймає форму

$$\gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln a_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ln \frac{a_i}{a_{i-1}}. \quad (\text{A.39})$$

Зауважимо, що як тільки $\epsilon_i = 1$, ми маємо $A_i = \lambda a_{i-1} A_0$, і, отже, $a_i = \lambda a_{i-1}$, так що внесок кожного вузла з $\epsilon_i = 1$ у суму в рівнянні (A.39) рівний $\ln \lambda$, де $\lambda = 1+x^2+y^2$. Зауважимо, що вектор A_i пропорційний до A_0 , незалежно від A_{i-1} , а це дозволяє точно обчислити показник Ляпунова. Один із прикладів такої ситуації був виявлений у роботі [268], де було проаналізовано частотний спектр ланцюжка легких та важких кульок, які з'єднані однаковими пружинками в границі, коли маси важких кульок нескінченно великі.

Щоб продовжити, зручно змінити нумерацію вузлів у ланцюжку. У цій процедурі будь-який вузол ланцюжка отримує мітку j з імовірністю qp^j (де $j \geq 0$). Тоді матимемо

$$\gamma = q \left(\ln \lambda + \sum_{j \geq 1} p^j \ln \frac{a_j}{a_{j-1}} \right). \quad (\text{A.40})$$

Вибираючи для більшої зручності

$$a_j = \frac{t_j}{\lambda}, \quad (\text{A.41})$$

вираз (A.40) спрощується і ми отримаємо

$$\gamma = q^2 \left(\ln \lambda + \sum_{j \geq 1} p^j \ln t_j \right). \quad (\text{A.42})$$

Далі, із (A.37) слідує, що t_j підкоряються чотиривузловому рекурентному співвідношенню

$$t_{j+3} - \lambda t_{j+2} + x^2 y^2 t_{j+1} + x^2 y^2 t_j = 0, \quad (\text{A.43})$$

з початковими умовами

$$t_{-2} = t_{-1} = 1 \quad \text{та} \quad t_0 = \lambda. \quad (\text{A.44})$$

Досить просто знайти перші кілька доданків у цьому рекурентному співвідношенні, просто перебираючи початкові умови, наприклад,

$$t_1 = \lambda^2 - 2x^2y^2, \quad t_2 = \lambda^3 - (3\lambda - 1)x^2y^2, \quad (\text{A.45})$$

і т.д. Загальний розв'язок для довільного j можна знайти стандартними методами, наприклад за допомогою характеристичного полінома $\mathcal{Q}(\eta)$ для W_0 (чи альтернативно для V_0). У цьому представленні

$$t_j = \sum_{k=1,2,3} \alpha_k \eta_k^{j+2}, \quad (\text{A.46})$$

де η_k – розв'язки характеристичного рівняння $\mathcal{Q}(\eta) = 0$:

$$\eta^3 - \lambda\eta^2 + (\eta + 1)x^2y^2 = (\eta - \eta_1)(\eta - \eta_2)(\eta - \eta_3). \quad (\text{A.47})$$

Зауважимо, що показник $(j + 2)$ у рівнянні (A.46) вибраний просто для зручності. Далі, оскільки V_0 – симетрична матриця, власні значення η_k ($k = 1, 2, 3$) є дійсними і задовільняють відповідно:

$$\eta_3 < 0 < \eta_2 < \eta_1, \quad (\text{A.48})$$

так, що власне значення η_1 є найбільшим по модулю. Всі три розв'язки η_k визначаються як

$$\begin{aligned} \eta_1 &= 2\sqrt{r} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos(X)\right) + \frac{1}{3}(1 + x^2 + y^2), \\ \eta_2 &= 2\sqrt{r} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos(X) - \frac{2\pi}{3}\right) + \frac{1}{3}(1 + x^2 + y^2), \\ \eta_3 &= 2\sqrt{r} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos(X) - \frac{4\pi}{3}\right) + \frac{1}{3}(1 + x^2 + y^2), \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

з

$$\begin{aligned} r &= \frac{1}{9} \left(x^2 (x^2 - (y^2 - 2)) + (y^2 + 1)^2 \right), \\ q &= \frac{1}{54} \left(x^2 (x^2 (2x^2 - 3(y^2 - 2)) - 3(y^2 (y^2 + 8) - 2)) + 2(y^2 + 1)^3 \right), \\ X &= \frac{q}{r^{3/2}}. \end{aligned}$$

Амплітуди α_k можна визначити з початкових умов (A.44). Тому після деяких розрахунків знаходимо

$$\alpha_k = \frac{\eta_k^2 - x^2 y^2}{\lambda \eta_k^2 - (2\eta_k + 3)x^2 y^2} \quad (\text{A.50})$$

або еквівалентно

$$\alpha_k \eta_k = 1 + \frac{2x^2 y^2}{\lambda \eta_k^2 - (2\eta_k + 3)x^2 y^2}. \quad (\text{A.51})$$

Вираз (A.42), разом з (A.43) та (A.44) [чи з (A.46) та (A.50)] дає точне значення показника Ляпунова. Показник Ляпунова, очевидно, є симетричною функцією від x та y . Це монотонно спадна функція за p , яка інтерполює між величиною $\gamma = \ln \lambda = \ln(1 + x^2 + y^2)$ (оскільки λ – найбільше власне значення матриці V_1), яке досягається для $p = 0$ та величиною $\gamma = \ln \eta_1$, (η_1 – найбільше власне значення матриці V_0), яке досягається для $p = 1$. Розглянемо поведінку показника Ляпунова у деяких граничних випадках:

- Для $p \rightarrow 0$ (тобто $q \rightarrow 1$) залишивши тільки доданок $j = 1$ у рівнянні (A.42), ми отримуємо наступний розклад:

$$\gamma = \ln \lambda + p \ln \left(1 - \frac{2x^2 y^2}{\lambda^2} \right) + \dots \quad (p \rightarrow 0). \quad (\text{A.52})$$

Доданок лінійний по p є від'ємним. Поправки вищого порядку є $O(p^2)$.

- Для $p \rightarrow 1$ (тобто $q \rightarrow 0$) велика кількість доданків [порядку $O(1/(1-p))$] вносять вклад у суму в рівнянні (A.42). Для великих j хорошим наближенням є $t_j \approx \alpha_1 \eta_1^{j+2}$. Отже, має місце наступний розклад:

$$\gamma = \ln \eta_1 + (1-p) \ln \alpha_1 \eta_1 + \dots \quad (p \rightarrow 1). \quad (\text{A.53})$$

Доданок лінійний по $(1-p)$ є додатнім, як наслідок (A.51), в якому знаменник додатній для $k = 1$. Поправки вищого порядку є $O((1-p)^2)$.

- Коли x та y є малими, показник Ляпунова лінійно залежить від p . Тоді ми матимемо $\eta_1 \approx \lambda - 2x^2 y^2$, (де $x^2 y^2$ є дуже малим), і більш загально

$$\gamma \approx \ln \lambda - 2x^2 y^2 p \approx x^2 + y^2 - 2px^2 y^2, \quad (\text{A.54})$$

що підтверджується розкладами (A.52) та (A.53).

- Коли x та y є великими обидва, показник Ляпунова лінійно залежить від $1 - p$. Припустимо для простоти, що відношення

$$g = \frac{y}{x} < 1 \quad (\text{A.55})$$

є фіксованим. Матимемо $\eta_1 \approx x^2$, $\eta_2 \approx y^2$, $\alpha_1 \eta_1 \approx 1$, $\alpha_2 \eta_2 \approx 1$, у той час як η_3 дуже малий, так що

$$t_j \approx x^{2(j+1)} + y^{2(j+1)}. \quad (\text{A.56})$$

Підставляючи останню оцінку в рівняння (A.42), після деяких розрахунків отримаємо

$$\gamma \approx \ln x^2 + (1 - p)^2 \sum_{j \geq 0} g^j \ln(1 + g^{2(j+1)}). \quad (\text{A.57})$$

Головний логарифмічно розбіжний внесок не залежить від p . Розклад (A.52) стає

$$\gamma \approx \ln x^2 + y^2 + p \ln \frac{x^4 + y^4}{(x^2 + y^2)^2} \quad (p \rightarrow 0), \quad (\text{A.58})$$

відповідно до (A.57). Тоді розклад (A.53) стає

$$\gamma \approx \ln x^2 + \frac{2(1 - p)y^2}{x^2(x^2 + y^2)} \quad (p \rightarrow 1), \quad (\text{A.59})$$

тоді як поправки у розкладі (A.57) мають множник $(1 - p)^2$, показуючи, що границі $x, y \rightarrow \infty$ та $p \rightarrow 1$ не комутують.

Таким чином, ми отримуємо наступний вираз для усередненого за безладом тиску у випадку замороженого безладу:

$$\beta P^{(quen)} = (1 - p)^2 \left(\ln \lambda + \sum_{j=1}^{\infty} p^j \ln \left(\sum_{k=1,2,3} \frac{(\eta_k^2 - x^2 y^2) \eta_k^{j+2}}{\lambda \eta_k^2 - (2\eta_k + 3)x^2 y^2} \right) \right), \quad (\text{A.60})$$

який можна переписати в термінах вихідних змінних як

$$\beta P^{(quen)} = (1 - p)^2 \ln(1 + z_A + z_B)$$

$$+ (1-p)^2 \sum_{j=1}^{\infty} p^j \ln \left(\sum_{k=1,2,3} \frac{(\eta_k^2 - z_A z_B) \eta_k^{j+2}}{(1 + z_A + z_B) \eta_k^2 - 2(z_A z_B) \eta_k - 3z_A z_B} \right), \quad (\text{A.61})$$

де η_k ($k = 1, 2, 3$), означені у (A.49).

A.2. Модель II: Каталітичні вузли

Заморожений безлад. Відображення моделі II на спін-1 модель

Використовуючи підхід, описаний в Додатку A.1, ми розглядаємо тут представлення нашої моделі II із замороженим безладом у термінах класичної спінової $S = 1$ моделі. Ми призначаємо кожному вузлу ланцюжка тристанову змінну σ_i , ($i = 1, \dots, N$), так що

$$\sigma_i = \begin{cases} +1, & \text{якщо } i\text{-ий вузол зайнятий частинкою } A, \\ -1, & \text{якщо } i\text{-ий вузол зайнятий частинкою } B, \\ 0, & \text{якщо } i\text{-ий вузол є вакантним.} \end{cases} \quad (\text{A.62})$$

Тоді булеві змінні n_i та m_i виражаються через σ_i як:

$$n_i = \frac{\sigma_i + \sigma_i^2}{2}, \quad m_i = \frac{-\sigma_i + \sigma_i^2}{2}. \quad (\text{A.63})$$

Граничні умови для цієї моделі $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

Константи зв'язку між найближчими сусідніми вузлами модифікуються у порівнянні з моделлю із каталітичними зв'язками, щоб врахувати, що тут реакція відбувається, коли будь-яка з частинок різного сорту знаходиться на каталітичному вузлі. У цьому випадку ми маємо

$$J_{i,j} = \begin{cases} -E_1 (\rightarrow 0), & \text{для сусідів } A - A, \\ -E_2 (\rightarrow 0), & \text{для сусідів } B - B, \\ +\eta_i \eta_j E_3 (E_3 \rightarrow \infty), & \text{для сусідів } A - B \text{ або } B - A, \\ 0, & \text{у іншому випадку.} \end{cases} \quad (\text{A.64})$$

У дужках вказані граничні значення цих констант зв'язку. Гамільтоніан такої системи визначається як

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle}^N [-n_i n_j E_1 - m_i m_j E_2 + \eta_i \eta_j (n_i m_j + n_j m_i) E_3] - \sum_{i=1}^N (\mu_A n_i + \mu_B m_i), \quad (\text{A.65})$$

де підсумовування у першому доданку проводиться знову за всіма парами найближчих сусідніх вузлів. Далі перепишемо гамільтоніан (A.65), замінюючи n_i та m_i виразами (A.63). Тоді матимемо

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{E_1 + E_2 + 2\eta_{i-1}\eta_i E_3}{8} \sum_{i=1}^N \sigma_{i-1}\sigma_i - \frac{E_1 + E_2 + 2\eta_i\eta_{i+1} E_3}{8} \sum_{i=1}^N \sigma_i\sigma_{i+1} \\ & - \frac{E_1 + E_2 - 2\eta_{i-1}\eta_i E_3}{8} \sum_{i=1}^N \sigma_{i-1}^2\sigma_i^2 - \frac{E_1 + E_2 - 2\eta_i\eta_{i+1} E_3}{8} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2\sigma_{i+1}^2 \\ & - \frac{E_1 - E_2}{4} \sum_{i=1}^N (\sigma_i\sigma_{i+1}^2 + \sigma_{i+1}\sigma_i^2) - \frac{\mu_A - \mu_B}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i - \frac{\mu_A + \mu_B}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2, \end{aligned} \quad (\text{A.66})$$

де параметри, що входять у гамільтоніан, позначені як

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{E_1 + E_2 + 2\eta_{i-1}\eta_i E_3}{8}, J_2 = \frac{E_1 + E_2 + 2\eta_i\eta_{i+1} E_3}{8}, \\ K_1 &= \frac{E_1 + E_2 - 2\eta_{i-1}\eta_i E_3}{8}, K_2 = \frac{E_1 + E_2 - 2\eta_i\eta_{i+1} E_3}{8}, \\ C &= \frac{E_1 - E_2}{4}, H = \frac{\mu_A - \mu_B}{2}, \text{ та } \Delta = -\frac{\mu_A + \mu_B}{2}, \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

щоб відповідати стандартному означенню загальної спіні-1 моделі [193, 258]. Знову ж таки, щоб вдатися до представлення трансфер-матриці, введемо локальні поля $\mu(\sigma_i)$ як

$$\mu(\sigma_i) = \begin{cases} -\mu_A, & \text{якщо } \sigma_i = 1, \\ +\mu_B, & \text{якщо } \sigma_i = -1, \\ 0, & \text{якщо } \sigma_i = 0. \end{cases} \quad (\text{A.68})$$

Отже, велика канонічна статистична сума записується у вигляді

$$Z_N^{(BEG)} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\sum_{i=1}^N (-\beta J_{i-1,i} \sigma_{i-1} \sigma_i - \beta J_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} - \beta \mu(\sigma_i) \sigma_i) \right], \quad (\text{A.69})$$

або еквівалентним чином як

$$Z_N^{(BEG)} = \text{Tr} \prod_{i=1}^N V_{i-1,i} V_{i,i+1}, \quad (\text{A.70})$$

де трансфер-матриці $V_{i,j}$

$$V_{i,j} = \begin{pmatrix} z_A^{1/2} & z_A^{1/4} (1-\eta_i)(1-\eta_j)(z_A z_B)^{1/4} \\ z_A^{1/4} & 1 \\ (1-\eta_i)(1-\eta_j)(z_A z_B)^{1/4} & z_B^{1/4} \\ z_B^{1/2} & z_A^{1/2} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.71})$$

як тільки ми покладемо $E_1 = E_2 = 0$ та $E_3 \rightarrow \infty$. Відзначимо також, що тут нижні індекси i, j позначають пари найближчих сусідніх вузлів. Оскільки трансфер-матриці $V_{i,j}$ мають аналогічну структуру, велика канонічна статистична сума (A.70) може бути переписана у наступному вигляді:

$$Z_N^{(BEG)} = \text{Tr} \prod_{i=1}^N (V_{i,i+1})^2. \quad (\text{A.72})$$

Зауважимо, що тут трансфер-матриці не є статистично незалежними і мають послідовні попарні кореляції.

ДОДАТОК Б

ДЕТАЛІ ДЕЯКИХ ВИВЕДЕНЬ ТА ОБЧИСЛЕНЬ ДЛЯ ҐРАТОК БЕТЕ ТА ФУШІМІ

Б.1. Ґратка Бете

Розв'язки типу нерухомої точки для рекурентних співвідношень

Симетрична фаза у порівнянні з фазою із порушеною симетрією. Розглянемо випадок, коли сила взаємодії між частинками одного й того ж сорту однакова, тобто $J_A = J_B = J$. У границі $N \rightarrow \infty$ допоміжні змінні $x_N \rightarrow x$ та $y_N \rightarrow y$, так що система рівнянь (4.119) приймає вигляд:

$$x = \tilde{g}(x, y), \quad \tilde{g}(x, y) = \frac{1 + e^{\beta J} z_A x^{q-1} + (1-p) z_B y^{q-1}}{1 + z_A x^{q-1} + z_B y^{q-1}}, \quad (\text{Б.1})$$

$$y = \tilde{h}(x, y), \quad \tilde{h}(x, y) = \frac{1 + (1-p) z_A x^{q-1} + e^{\beta J} z_B y^{q-1}}{1 + z_A x^{q-1} + z_B y^{q-1}}. \quad (\text{Б.2})$$

Тоді вільна енергія на один вузол ґратки Бете підкоряється рівнянню (4.128).

Оскільки ми розглядаємо нескінченно глибоку внутрішню частину дерева Кейлі, в якій усі вузли є еквівалентними, середні гутини обох сортів частинок визначаються виразами (4.122),

$$\rho^{(A)} = \frac{z_A x^q}{1 + z_A x^q + z_B y^q}, \quad \rho^{(B)} = \frac{z_B y^q}{1 + z_A x^q + z_B y^q}. \quad (\text{Б.3})$$

Дотримуючись [198], спочатку ми формально переписуємо рівняння (Б.1) та (Б.2) до форми

$$z_A x^{q-1} = \frac{x(1 - e^{\beta J}) - py + p + e^{\beta J} - 1}{(1 - p - e^{\beta J})(1 - p + e^{\beta J} - x - y)} \quad (\text{Б.4})$$

$$z_B y^{q-1} = \frac{y(1 - e^{\beta J}) - px + p + e^{\beta J} - 1}{(1 - p - e^{\beta J})(1 - p + e^{\beta J} - x - y)}. \quad (\text{Б.5})$$

Далі, вводячи допоміжні змінні $u = (x + y)/2$ та $v = (x - y)/2$, ми отримаємо наступні два рівняння:

$$z_A z_B = \frac{((u - 1)^2 - \alpha^2 v^2)}{4(\gamma - u)^2 (u^2 - v^2)^{q-1}}, \quad (\text{Б.6})$$

$$z_A / z_B = \frac{(u - 1 + \alpha v)(u - v)^{q-1}}{(u - 1 - \alpha v)(u + v)^{q-1}}, \quad (\text{Б.7})$$

де α та γ задаються як

$$\alpha = \frac{1 - e^{\beta J} + p}{1 - e^{\beta J} - p}, \quad \gamma = (1 - p + e^{\beta J})/2. \quad (\text{Б.8})$$

Стандартний аналіз (див. [198]), який ми проводимо тільки для симетричного випадку $z_A = z_B = z$, показує, що існують два різні розв'язки типу НТ, що відповідають двом стійким термодинамічним фазам.

(i) Розв'язок з $v = 0$ дається у формі

$$z = \frac{u - 1}{2(\gamma - u)u^{q-1}}, \quad (\text{Б.9})$$

що відповідає випадку з рівними середніми густинами частинок A та B . Таким чином, цей розв'язок описує неупорядковану симетричну фазу.

(ii) Розв'язок з $v \neq 0$ визначається двома наступними рівняннями

$$\left\{ \begin{array}{l} (\alpha - (q - 1)\frac{u-1}{u}) + (C_{q-1}^2 \alpha - C_{q-1}^2 \frac{u-1}{u}) \left(\frac{v}{u}\right)^2 + \dots + \alpha \left(\frac{v}{u}\right)^{q-1} \\ \text{для непарних } q \\ (\alpha - (q - 1)\frac{u-1}{u}) + (C_{q-1}^2 \alpha - C_{q-1}^2 \frac{u-1}{u}) \left(\frac{v}{u}\right)^2 + \dots + (\alpha(q - 1) - \frac{u-1}{u}) \left(\frac{v}{u}\right)^{q-1} \\ \text{для парних } q \end{array} \right\} = 0, \quad (\text{Б.10})$$

де C_n^k позначає біноміальний коефіцієнт, а

$$z^2 = \frac{(u - 1)^2 - \alpha^2 v^2}{4(\gamma - u)^2 (u^2 - v^2)^{q-1}}. \quad (\text{Б.11})$$

Цей розв'язок визначає фазу зі спонтанно порушеною симетрією між частинками. Відповідно, поверхня розмежування між симетричною фазою та фазою з порушеною симетрією в області неперервних переходів отримується підстановкою $v = 0$

у вираз (Б.9), що дає $u_c = (q - 1)/(q - 1\alpha)$ при переході. Потім підставляючи останній вираз для u_c у рівняння (Б.10) та вважаючи $v = 0$, ми отримуємо

$$z_c = \frac{u_c - 1}{2(\gamma - u_c)u_c^{q-1}}. \quad (\text{Б.12})$$

У свою чергу, лінію трикритичних точок ми знаходимо з умови

$$\left. \frac{\delta z}{\delta u} \right|_{v=0} = \left. \frac{\partial z}{\partial u} \right|_{v=0} + \left. \frac{\partial z}{\partial v^2} \frac{\partial v^2}{\partial u} \right|_{v=0} = 0, \quad (\text{Б.13})$$

яку слід взяти при $u = u_c$. Підставляючи рівняння (Б.11) в умову (Б.13), отримуємо

$$\frac{(q-1)}{(\gamma-1)(q-1-\alpha)-\alpha} - q + 2 - \frac{(q-3)(q-1-\alpha)}{2q(q-1)} = 0. \quad (\text{Б.14})$$

Лінія фазових переходів першого роду, яка зустрічається у трикритичній точці з лінією фазових переходів другого роду, може бути отримана, прирівнюючи вільні енергії (див. рівняння (4.128)), розраховані для різних фаз.

Нарешті, відзначимо, що отримані вирази для граничних значень допоміжних змінних x та y разом з виразами (Б.3), що визначають середні густини, дозволяють ввести природний параметр порядку $\Delta\rho = |\rho^{(A)} - \rho^{(B)}|$. Останній явно задається як

$$\Delta\rho = v \frac{u(1+\alpha) - 1}{u(u-2) + \alpha v^2 + \gamma}. \quad (\text{Б.15})$$

Цей параметр рівний нулеві у симетричній фазі та відмінний від нуля у фазі з порушеною симетрією (див. рисунок 4.4). Нижче у розділі Б.1 ми аналізуємо його поведінку для μ , яке близьке до критичного значення хімічного потенціалу μ_c .

Симетрична фаза зі структурним порядком. Як ми вже згадували у основному тексті, рівняння, що описують симетричну фазу зі змінним порядком, отримуються із рекурентних співвідношень (4.119) шляхом їх повторення, щоб виразити x_N та y_N через x_{N-2} та y_{N-2} , в яких N та $N-2$ мають однакову парність. Переходячи до границі $N \rightarrow \infty$, ми формально переписемо рівняння (Б.1) та (Б.2) у вигляді

$$x = \tilde{g}(\tilde{g}(x, y), \tilde{h}(x, y)), \quad y = \tilde{h}(\tilde{g}(x, y), \tilde{h}(x, y)). \quad (\text{Б.16})$$

Тоді ми виявимо, що для $q = 3$, для деякого від'ємного J та для певного інтервалу значень p рівняння (Б.16) мають три типи розв'язків з $x = y$ (або $v = 0$) :

(i) Розв'язок $x_{odd} = x_{even} = y_{odd} = y_{even}$, рівняння (Б.9), що відповідає випадку рівних середніх густин частинок A та B і відсутністю змінного порядку.

(ii) Розв'язок $x_{odd} = y_{odd} \neq x_{even} = y_{even}$ є одним з розв'язків наступного квадратного рівняння, отриманого повторенням рекурентної схеми,

$$u^2 z \left(z (e^J - p + 1)^2 + 2 \right) + u z (e^J - p - 1) + z (e^J - p + 1) + 1 = 0, \quad u = (x + y) / 2. \quad (\text{Б.17})$$

Зауважимо, що тут є зміна порядку, коли система спонтанно розбивається на дві різні підґратки: частинки A та B займають переважно одну з підґраток, а друга у свою чергу майже порожня. Ця фаза (РАО I) визначається наступною нерівністю

$$z (1 + p - e^{\beta J})^2 - 4 \left(z (1 - p + e^{\beta J}) + 1 \right) \left(z (1 - p + e^{\beta J})^2 + 2 \right) \geq 0, \quad (\text{Б.18})$$

що, у свою чергу, дає умову, що розв'язок рівняння (Б.17) є дійсним.

(iii) Розв'язок $x_{odd} = y_{even} \neq x_{even} = y_{odd}$. Ми знаходимо цей розв'язок з наступного квадратного рівняння:

$$z (u_1^2 + e^{2\beta J}) (e^{\beta J} + p - 1) + (u_1 - e^{\beta J}) \sqrt{z (e^{\beta J} + p - 1)} \left((u_1 + p - 1) \sqrt{z (e^{\beta J} + p - 1)} - \sqrt{z (e^{\beta J} - p + 1)^2 (e^{\beta J} + p - 1) + 4 (e^{\beta J} - p - 1)} \right) + 2e^{\beta J} - 2 = 0, \quad (\text{Б.19})$$

де $u_1 = (x_{odd} + y_{even}) / 2$, $u_2 = (x_{even} + y_{odd}) / 2$ і тому

$$u_2^2 = \frac{u_1 - 1 + z u_1^2 (u_1 - 1 + p)}{z (e^{\beta J} - u_1)}. \quad (\text{Б.20})$$

Розв'язки рівнянь (Б.19) та (Б.20) відповідають іншому типу змінного порядку, коли система спонтанно розпадається на дві різні підґратки, що містять переважно різні сорти частинок, тобто частинки A та B займають переважно різні підґратки (РАО II). Ця фаза визначається нерівністю:

$$4 z (3e^{\beta J} + p - 1)(e^{\beta J} + p - 1)^2 + (3e^{\beta J} + p - 3)^2 \geq 0. \quad (\text{Б.21})$$

Критичні показники

Ми зосередимося тут на критичному показнику, що описує скейлінгову поведінку параметра порядку в околі критичної точки. Дотримуючись методології [198] позначимо

$$u - u_c = u_c \delta, \quad v = u_c \varepsilon, \quad (\text{Б.22})$$

де $u_c = (q - 1)/(q - 1 - \alpha)$. Розкладаючи вирази (Б.10) та (Б.11) поблизу лінії критичних точок, ми отримаємо

$$h = \varepsilon \left[1 - q + \alpha a + (q - 1 - \alpha a^2) \delta + \frac{1}{3} (1 - q + \alpha^3 a^3) \varepsilon^2 + (1 - q + \alpha a^3) \delta^2 + (q - 1 - \alpha^3 a^4) \delta \varepsilon^2 + \frac{1}{5} (1 - q + \alpha^5 a^5) \varepsilon^4 + \mathcal{O}(\varepsilon^6, \varepsilon^4 \delta, \varepsilon^2 \delta^2, \delta^3) \right], \quad (\text{Б.23})$$

$$\mu - \mu_c = -(q - 1 - a - b) \delta + \frac{1}{2} (q - 1 - \alpha^2 a^2) \varepsilon^2 + \frac{1}{2} (q - 1 - a^2 + b^2) \delta^2 - (q - 1 - \alpha^2 a^3) \varepsilon^2 \delta + \frac{1}{4} (q - 1 - \alpha^4 a^4) \varepsilon^4 + \mathcal{O}(\varepsilon^6, \varepsilon^4 \delta, \varepsilon^2 \delta^2, \delta^3), \quad (\text{Б.24})$$

де $h = (\mu_A - \mu_B)/2$, $\mu = (\mu_A + \mu_B)/2$, μ_c визначається у рівнянні (Б.12), а $a = u_c/(u_c - 1)$ та $b = u_c/(\gamma - u_c)$. Отже, поведінка параметра порядку [який означений у рівнянні (Б.15)] в околі критичної точки визначається виразом

$$\Delta \rho = \frac{u_c [u_c(1 + \alpha) - 1]}{u_c(u_c - 2) + \gamma} \varepsilon + \mathcal{O}(\delta, \varepsilon^3). \quad (\text{Б.25})$$

Далі, використовуючи умову $h = 0$, знаходимо, що $\delta = \varepsilon^2(q - 2)q(u_c - 1)/3$ у критичних точках, і, як впливає з рівняння (Б.24)

$$\mu - \mu_c = \mu_1 \Delta \rho^2 + \mathcal{O}(\Delta \rho^4), \quad (\text{Б.26})$$

з

$$\mu_1 = \frac{(q-2) u_c(u_c-2)+\gamma}{3q^2 (u_c-1)^2 u_c^3} \left(\frac{(q-1)}{(\gamma-1)(q-1-\alpha)-\alpha} - q + 2 - \frac{(q-3)(q-1-\alpha)}{2q(q-1)} \right). \quad (\text{Б.27})$$

Звідси випливає, що в околі лінії критичних точок скейлінгова поведінка параметра порядку характеризується класичним критичним показником середнього поля $\beta = 1/2$ (тобто $\Delta \rho \sim |\mu - \mu_c|^\beta$). Однак це невірно для трикритичної точки, в якій μ_1 обертається в нуль, $\mu_1 = 0$. У трикритичній точці розклади (Б.26) гарантують, що трикритичний показник $\beta_2 = 1/4$.

Середня густина частинок на ґратці Бете при $\mu = 0$ та $J = 0$

З рівняння (Б.3) отримуємо, що середні густини частинок обох сортів при нульовому хімічному потенціалі та нульовій силі взаємодії між частинками одного й того сорту J мають вигляд

$$\rho = \rho_A = \rho_B = \frac{x^q}{1 + 2x^q}, \quad (\text{Б.28})$$

де x задовільняє рівнянню

$$(x - 1)(1 + 2x^{q-1}) + px^{q-1} = 0. \quad (\text{Б.29})$$

Для $p = 0$ (тобто ніяких інших взаємодій між частинками різного сорту, окрім твердого кору), єдиним дійсним додатнім розв'язком рівняння (Б.29) з довільним $q \in x \equiv 1$. Отже, з рівняння (Б.28) маємо $\rho \equiv 1/3$. Цей результат очевидний, оскільки в даному випадку ми маємо модель з трьома станами без взаємодій та зовнішніх полів. Отже, кожен із сортів, а також і вакантні вузли присутні з однаковою середньою густиною.

Для $p \neq 0$ розв'язок рівняння (Б.29) залежить як від q , так і від p , а середня густина, яка визначається рівнянням (Б.28), очевидно, є спадною функцією цих параметрів. На рисунку 4.3 (а) для $q = 3$ ми вибрали $p = 0.3$ і, таким чином, знаходимо, що густина частинок при $\mu = 0$ та $J = 0$ дорівнює $\rho \approx 0.2993$, а для $p = 0.7$ на рисунку 4.3 (б) густина при $\mu = 0$ та $J = 0$ рівна $\rho \approx 0.2543$.

Б.2. Ґратка Фушімі

Виведення рекурентних співвідношень для x_N та y_N

Велика канонічна статистична сума на ґратці Фушімі з N поколіннями спочатку записується у тій же формі, що і для ґратки Бете [див. рівняння (4.115)], з урахуванням трьох можливих подій, пов'язаних із зайнятістю кореневого вузла. Потім ми виражаємо великі канонічні статистичні суми кореневих дерев із заданою зайнятістю кореневого вузла O , тобто $Z_N^{(0)}(p)$, $Z_N^{(A)}(p)$ та $Z_N^{(B)}(p)$, через

допоміжні функції $D_N(0, p)$, $D_N(A, p)$ та $D_N(B, p)$:

$$Z_N^{(0)}(p) = D_N^t(0, p), \quad Z_N^{(A)}(p) = z_A^{1-t} D_N^t(A, p), \quad Z_N^{(B)}(p) = z_B^{1-t} D_N^t(B, p), \quad (\text{Б.30})$$

та знаходимо, слідуючи тій же процедурі подібно до ґратки Бете, що функції D_N підкоряються рекурентним співвідношенням наступного вигляду:

$$\begin{aligned} D_N(0, p) = & D_{N-1}^{2(t-1)}(0, p) + 2z_A^{2-t} D_{N-1}^{t-1}(0, p) D_{N-1}^{t-1}(A, p) \\ & + 2z_B^{2-t} D_{N-1}^{t-1}(0, p) D_{N-1}^{t-1}(B, p) + 2z_A^{2-t} z_B^{2-t} (1-p) D_{N-1}^{t-1}(A, p) D_{N-1}^{t-1}(B, p) \\ & + z_A^{2(2-t)} e^{\beta J_A} D_{N-1}^{2(t-1)}(A, p) + z_B^{2(2-t)} e^{\beta J_B} D_{N-1}^{2(t-1)}(B, p), \end{aligned} \quad (\text{Б.31})$$

$$\begin{aligned} D_N(A, p) = & z_A D_{N-1}^{2(t-1)}(0, p) + 2z_A^{3-t} e^{\beta J_A} D_{N-1}^{t-1}(0, p) D_{N-1}^{t-1}(A, p) \\ & + 2z_A z_B^{2-t} (1-p) D_{N-1}^{t-1}(0, p) D_{N-1}^{t-1}(B, p) \\ & + 2z_A^{3-t} z_B^{2-t} (1-p) e^{\beta J_A} D_{N-1}^{t-1}(A, p) D_{N-1}^{t-1}(B, p) \\ & + z_A^{5-2t} e^{3\beta J_A} D_{N-1}^{2(t-1)}(A, p) + z_A z_B^{2(2-t)} e^{\beta J_B} (1-p)^2 D_{N-1}^{2(t-1)}(B, p). \end{aligned} \quad (\text{Б.32})$$

Аналогічний вираз для $D_N(B)$ отримується з рівняння (Б.32) простою заміною $A \leftrightarrow B$.

Вільна енергія та середні густини

Виконуючи ту ж процедуру, що й у підрозділі 4.2.2 для ґратки Бете (див. також [263]), ми знаходимо, що для ґратки Фушімі з n поколіннями, які знаходяться глибоко всередині дерева, вільна енергія задовільняє наступному виразу

$$\begin{aligned} -\beta F_n = & t \frac{2^n (t-1)^n - 1}{2(t-1) - 1} \ln \left(1 + 2z_A x^{t-1} + 2z_B y^{t-1} + 2z_A z_B (1-p) x^{t-1} y^{t-1} \right. \\ & \left. + z_A^2 e^{\beta J_A} x^{2(t-1)} + z_B^2 e^{\beta J_B} y^{2(t-1)} \right) - (2^n (t-1)^n - 1) \ln(1 + z_A x^t + z_B y^t), \end{aligned} \quad (\text{Б.33})$$

де x та y – розв’язки типу НТ, які даються рівняннями (4.140). Згідно з [263], вільна енергія, що припадає на один вузол дерева Фушімі отримується, розділивши вираз (Б.33) на кількість вузлів N_s^H , що дорівнює $3((t-1)^n 2^n - 1)/(2(t-1) - 1)$. Отже, вільна енергія, яка припадає на один вузол ґратки Фушімі, визначається

виразом

$$-\beta f = -\frac{\beta F_n}{N_s^H} = \frac{t}{3} \ln \left(1 + 2z_A x^{t-1} + 2z_B y^{t-1} + 2z_A z_B (1-p)x^{t-1}y^{t-1} \right. \\ \left. + z_A^2 e^{\beta J_A} x^{2(t-1)} + z_B^2 e^{\beta J_B} y^{2(t-1)} \right) - \frac{2t-3}{3} \ln(1 + z_A x^t + z_B y^t). \quad (\text{Б.34})$$

Ми обмежуємо наш аналіз в основному тексті конкретним вибором $t = 2$. Для такого вибору кількість (N_s^H) вузлів дерева Фішімі та кількість (N_s^B) вузлів дерева Кейлі з $q = 3$ рівна $N_s^B/N_s^H = 2/3$.

У свою чергу, середні густини обох сортів частинок на кореновому вузлі визначаються у загальному вигляді рівнянням (4.121). Далі, використовуючи рівняння (Б.30) та (4.140), ми отримуємо такі вирази

$$\rho_0^{(A)} = \frac{z_A x_N^t}{1 + z_A x_N^t + z_B y_N^t}, \quad \rho_0^{(B)} = \frac{z_B y_N^t}{1 + z_A x_N^t + z_B y_N^t}. \quad (\text{Б.35})$$

Відповідно, звертаючись до розв'язків рекурентних співвідношень, ми отримуємо, що середні густини частинок A та B на ґратці Фішімі задаються виразами

$$\rho^{(A)} = \frac{z_A x^t}{1 + z_A x^t + z_B y^t}, \quad \rho^{(B)} = \frac{z_B y^t}{1 + z_A x^t + z_B y^t}. \quad (\text{Б.36})$$

Так само, як і в випадку ґратки Бете, ми можемо визначити тут параметр порядку як різницю $\rho^{(A)}$ та $\rho^{(B)}$: $\Delta\rho = |\rho^{(A)} - \rho^{(B)}|$. Використовуючи рівняння (Б.36), ми можемо знайти явну форму $\Delta\rho$ у термінах симетричних змінних $u = (x + y)/2$ та $v = (x - y)/2$. В результаті, різниця $\rho^{(A)}$ та $\rho^{(B)}$ дається наступним виразом:

$$\Delta\rho = |\rho^{(A)} - \rho^{(B)}| = \frac{4zuv}{1 + 2z(u^2 + v^2)}. \quad (\text{Б.37})$$

Поверхня критичних точок

В основному тексті ми показали, що для $J > 0$ існують два різних типи розв'язків рекурентних співвідношень (4.142), які відповідають симетричній фазі [див. рівняння (4.143)] та фазі з порушеною симетрією [див. рівняння (4.144) та (4.145)]. Щоб обчислити вираз, який неявно визначає поверхню критичних точок,

ми розв'язуємо систему рівнянь (4.143) та (4.144). Опускаючи проміжні етапи, нижче ми наводимо рівняння для $t = 2$, $J_A = J_B = J$ та $z_A = z_B = z$:

$$\begin{aligned}
& 4z^2 e^{8\beta J} (e^{\beta J} - 1) + 4ze^{7\beta J} \left(1 - (1-p)(9-7p)z\right) - e^{6\beta J} \left(1 + 4(3+p)z - 52(1-p)^2 z^2\right) \\
& - 4ze^{5\beta J} \left(8 - 10(2-p)p + (1-p)^3(15-11p)z\right) \\
& + 2e^{4\beta J} \left(3 - 5(2-p)p + 52z - 4p(23-p(9+p))z - 78(1-p)^4 z^2\right) \\
& - 4e^{3\beta J} \left(1 - 5p - (1-p)^2(1-25(2-p)p)z - 5(1-p)^5(5+p)z^2\right) \\
& - e^{2\beta J} \left((3-5(2-p)p)^2 + 4(1-p)^2(55-121p+5p^2(13-3p))z + 20(1-p)^6 z^2\right) \\
& + 4(1-p)e^{\beta J} \left(3 - 22p + 25p^2 + 54(1-p)^3 z\right) - 4(1-p)^2 \left(1 - 8p + 16z(1-p)^2\right) = 0. \quad (\text{Б.38})
\end{aligned}$$

Аналізуючи рівняння (Б.38), ми робимо висновок, що неперервний фазовий перехід має місце для наступного значення активності z :

$$z_c = \exp((\beta\mu)_c) = \frac{\mathcal{D} - c_1}{2c_2}, \quad (\text{Б.39})$$

де \mathcal{D} , c_1 та c_2 задаються як

$$\begin{aligned}
\mathcal{D} &= \left(e^{6\beta J} + e^{2\beta J}(1-p)(6e^{\beta J} + 15 - 33p + 5(3-p)p^2) - 2e^{4\beta J}(4 - 3(2-p)p) \right. \\
&\quad \left. + 2(1-p)^3(4 - 11e^{\beta J})\right) \left(e^{3\beta J} + (4 - 5e^{\beta J})(1-p)^2\right)^{1/2}, \\
c_1 &= e^{6\beta J}(e^{\beta J} - 3 - p) - 2e^{5\beta J}(4 - 5(2-p)p) - 2e^{4\beta J}(1-p)(13 - (10+p)p) \\
&\quad + e^{2\beta J}(1-p)^2 \left(e^{\beta J}(1 - 25(2-p)p) - (55 - (121 - 5p(13-3p))p)\right) \\
&\quad - 2(1-p)^4(8 - 27e^{\beta J}), \\
c_2 &= e^{2\beta J} \left(e^{2\beta J} - 5(1-p)^2\right) (e^{\beta J} - 1 + p)^2 \left(e^{2\beta J}(e^{\beta J} + 1 - 2p) - e^{\beta J}(1-p)(3+p) + (1-p)^2\right).
\end{aligned}$$

Прирівнюючи c_2 до нуля, що входить у рівняння (Б.39), ми легко знаходимо граничне значення $J(p)$ у рівнянні (4.146).

Лінія трикритичних точок

Тут ми представляємо точний розв'язок, що визначає лінію трикритичних точок (див. рисунок 4.14) на ґратці Фушімі, яка отримується точно з тих же

мірkvань, що й у випадку ґратки Бете (див. розділ Б.1). Для ґратки Фушімі він має досить складний вид:

$$\begin{aligned}
& e^{12(\beta J)tc} + 4e^{11(\beta J)tc}(1-p) - 4e^{10(\beta J)tc} \left(6 - (2-p)p \right) - 4e^{9(\beta J)tc}(1-p) \left(26 - 9(2-p)p \right) \\
& + 2e^{8(\beta J)tc} \left(71 - 16p - (56 - 17(4-p)p) p^2 \right) \\
& + 4e^{7(\beta J)tc} \left(168 - 474p + 511p^2 - (281 - 15(5-p)p) p^3 \right) \\
& - 4e^{6(\beta J)tc}(1-p) \left(145 + 113p - 477p^2 + 5(83 - 7(5-p)p) p^3 \right) \\
& - 4e^{5(\beta J)tc}(1-p)^2 \left(446 - 936p + 383p^2 + (39 - 25(5-p)p) p^3 \right) \\
& + e^{4(\beta J)tc}(1-p)^2 \left(1785 - 78p - 4357p^2 + 3308p^3 - 25(29 + (6-p)p) p^4 \right) \\
& + 4e^{3(\beta J)tc}(1-p)^3 \left(391 - 1264p + 556p^2 + 5(44 - 19p) p^3 \right) \\
& - 4e^{2(\beta J)tc}(1-p)^4 \left(603 - 170p - (517 - 52p) p^2 \right) \\
& + 16(1-p)^5 \left(14e^{(\beta J)tc}(3+5p) + 4(1-p) \right) = 0.
\end{aligned} \tag{Б.40}$$

Середні густини частинок на ґратці Фушімі при $\mu = 0$ та $J = 0$

Аналогічно на ґратці Фушімі середні густини частинок для $\mu = 0$ та $J = 0$ задаються виразом

$$\rho = \rho_A = \rho_B = \frac{x^t}{1 + 2x^t}, \tag{Б.41}$$

де x задовільняє рівнянню

$$(x - 1) (1 + 4x^{t-1}(1 + x^{t-1})) + px^{t-1} (2 + (4 - 3p)x^{t-1}) = 0. \tag{Б.42}$$

При $p = 0$ єдиним дійсним додатнім розв'язком рівняння (Б.42) є $x \equiv 1$ для довільного t , що знову тягне за собою тривіальний результат $\rho \equiv 1/3$. При $p \neq 0$ середня густина ρ знову є спадною функцією параметрів p та t . На рисунку 4.15 (а) для $t = 2$ ми вибрали $p = 0.3$, і, таким чином, знаходимо, що густина при $\mu = 0$ та $J = 0$ рівна $\rho \approx 0.2922$, у той час як для $p = 0.7$ на рисунку 4.15 (б) густина при $\mu = 0$ та $J = 0$ дорівнює $\rho \approx 0.2529$, що є дещо більшим відповідного значення середньої густини на ґратці Бете.

ДОДАТОК В

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА

1. *Shapoval D., Dudka M., Durang X., Henkel M.* Crossover between diffusion-limited and reaction-limited regimes in the coagulation–diffusion process // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2018. Vol. 51, no. 42. P. 425002.
2. *Shapoval D., Dudka M., Bénichou O., Oshanin G.* Equilibrium properties of two-species reactive lattice gases on random catalytic chains // *Phys. Rev. E.* 2020. Vol. 102. P. 032121.
3. *Shapoval D., Dudka M., Bénichou O., Oshanin G.* Binary lattice-gases of particles with soft exclusion: exact phase diagrams for tree-like lattices // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2021. Vol. 54, no. 38. P. 385003.
4. *Shapoval D., Blavatska V., Dudka M.* Survival in two-species reaction-diffusion system with Lévy flights: Renormalization group treatment and numerical simulations // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2022. Vol. 55, no. 45. P. 455002.
5. On the crossover between diffusion-limited and reaction-limited particle systems / D. Shapoval, M. Dudka, X. Durang, M. Henkel // “Різдвяні дискусії 2018”, Кафедра теоретичної фізики, Львівський національний університет ім. І. Франка, Тези доповідей Львів, Україна, 27–30 січня 2018. С. 8
6. On the crossover between diffusion-limited and reaction-limited particle systems / D. Shapoval, M. Dudka, X. Durang, M. Henkel // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Тези доповідей. Львів, Україна, 7–8 червня 2018. С. 44

7. On the crossover between diffusion-limited and reaction-limited particle systems / D. Shapoval, M. Dudka, X. Durang, M. Henkel // 43-st International Conference “Middle European Cooperation in Statistical Physics” (MECO43), Abstracts. Krakow, Poland, 1–4 May 2018. P. 95
8. Two-species reactive lattice gases on random catalytic chains: Annealed versus quenched disorder / M. Dudka, D. Shapoval, G. Oshanin, O. Bénichou // XIX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Тези доповідей. Львів, Україна, 13–14 червня 2018. С. 34
9. Two-species reactive lattice gases on random catalytic chains: Annealed versus quenched disorder / M. Dudka, D. Shapoval, G. Oshanin, O. Bénichou // The 5th Conference “Statistical Physics: Modern Trends and Applications” (StatPhys2019) Dedicated to the 110th anniversary of the birth of M.M. Bogolyubov, Abstracts. Lviv, Ukraine, 3–6 July 2019. P. 151
10. Equilibrium properties of two-species reactive lattice gases on random catalytic chains and hierarchical lattices / D. Shapoval, M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin // International conference “Modern Problems of Solid State and Statistical Physics”, Abstracts. Kyiv, Ukraine, 14–15 September 2020. P. 28
11. Equilibrium properties of binary reactive adsorbate on random catalytic recursive lattices / D. Shapoval, M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin // XX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Тези доповідей. Львів, Україна, 15–16 жовтня 2020. С. 28
12. Binary mixtures of particles with soft exclusion: Exact phase diagrams for tree-like lattices / D. Shapoval, M. Dudka, O. Bénichou, G. Oshanin // 46-st International Conference “Middle European Cooperation in Statistical Physics” (MECO46), Abstracts. Riga, Latvia, 11–13 May 2021. P. 49
13. Скейлінг у моделях реакційно-дифузійних процесів та утворених структур у неоднорідних середовищах / Д. Шаповал // XXI Всеукраїнська школа-

семинар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Тези доповідей. Львів, Україна, 11–12 жовтня 2021. С. 14

14. Two-species reaction-diffusion system with Lévy flights / D. Shapoval, V. Blavatska, M. Dudka // 13th Workshop on current problems in physics, Abstracts. Lviv, Ukraine, 26-27 October 2021. P. 21
15. Long-range hops in a two-species reaction-diffusion system: renormalization group and numerical simulations / D. Shapoval, V. Blavatska, M. Dudka // XII Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics”, Abstracts. Kyiv, Ukraine, 21-22 December 2021. P. 4

ДОДАТОК Г

АПРОБАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ

Результати досліджень були представлені на конференціях:

- Різдвяні дискусії на кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету ім. І. Франка (Львів, 2018 р.);
- StatPhys2019: the 5th Conference “Statistical Physics: Modern Trends and Applications” dedicated to the 110th anniversary of the birth of M.M. Bogolyubov (Львів, 2019);
- International conference “Modern Problems of Solid State and Statistical Physics” (Київ, 2020);
- 13th Workshop on current problems in physics (Львів, 2021);
- XII Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics” (Київ, 2021);
- Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics: MECO43 (Краків, 2018) та MECO46 (Рига, 2021);
- XVIII, XIX, XX, XXI Всеукраїнські школи-семінари і конкурси молодих вчених зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини (Львів, 2018 – 2021 рр.).

Результати досліджень також були представлені на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України та Лабораторії статистичної фізики складних систем ІФКС НАН України.