

УДК 538.975,530.182,621.89.012

УКПП

№ держреєстрації 0118U003584

Інв. №

Міністерство освіти і науки України  
Сумський державний університет (СумДУ)  
40007, м. Суми, вул. Р.-Корсакова, 2: тел. (0542) 33-41-08,  
факс (0542) 33-40-49

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з наукової роботи  
д-р фіз.-мат. наук, проф.

\_\_\_\_\_ А.М. Чорноус

ЗВІТ

ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ

**АТОМІСТИЧНЕ ТА СТАТИСТИЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ  
ФОРМУВАННЯ ТА ТЕРТЯ НАНОРОЗМІРНИХ СИСТЕМ**

(проміжний)

Начальник НДЧ

канд. фіз.-мат. наук, с.н.с.

Науковий керівник НДР

д-р фіз.-мат. наук, проф.

Д.І. Курбатов

О.В. Хоменко

Суми - 2018

Рукопис закінчено 26 грудня 2018 р.

Результати роботи розглянуто на засіданні наукової ради СумДУ, протокол № 6 від 27.12.2018

## СПИСОК АВТОРІВ

- Керівник НДР,  
Головний науковий співробітник,  
д-р фіз.-мат. наук, професор  
(26.12.2018) О. В. Хоменко  
(розд. 1, 2, 3)
- Відповідальний виконавець,  
Провідний науковий співробітник,  
канд. фіз.-мат. наук, доцент  
(26.12.2018) О. В. Ющенко  
(розд. 1, 2, 3)
- Виконавці:  
Лаборант,  
канд. фіз.-мат. наук  
(26.12.2018) Д. С. Трощенко  
(підрозд. 1.2)
- Лаборант,  
студент  
(26.12.2018) М. О. Хоменко  
(підрозд. 2.1, 2.3)
- Лаборант,  
фахівець 1-ї категорії  
(26.12.2018) М. А. Руденко  
(підрозд. 1.1)
- Лаборант,  
аспірант  
(26.12.2018) Д. В. Бойко  
(підрозд. 3.3,3.4)

Лаборант,  
аспірант

(26.12.2018)

М. В. Захаров  
(підрозд. 3.1, 3.2)

Лаборант,  
аспірант

(26.12.2018)

Д. М. Крекшин  
(підрозд. 3.4,3.5)

Лаборант,  
студент

(26.12.2018)

Д. Т. Логвиненко  
(підрозд. 2.2)

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 66 с., 8 рис., 1 табл., 107 джерел.

НАНОЧАСТИНКИ, САМООРГАНІЗАЦІЯ, ПАРАМЕТР ПОРЯДКУ, ФЛУКТУАЦІЇ, НЕАДИТИВНІСТЬ.

Об'єкт дослідження – переходи між різними режимами поведінки ансамблю наночастинок як неадитивних складних систем у процесі самоорганізації.

Мета роботи – розробка оптимальних теоретичних моделей, що дозволяють описати властивості та поведінку наночастинок, їх індивідуальну динаміку та колективні ефекти в ансамблях наночастинок в залежності від впливу зовнішніх параметрів.

Методи дослідження – метод розв'язання системи нелінійних рівнянь в рамках адіабатичного наближення; числовий метод дослідження динаміки процесу на основі фазових портретів; аналітичне дослідження динаміки самоорганізації методом показників Ляпунова; метод Мартіна-Сіггіа-Роуза для побудови польової теорії неадитивних систем; підходи теорії середнього поля під час аналізу мікроскопічної моделі опису процесів самоорганізації.

В результаті проведеного дослідження розглянута динаміка процесу самоорганізації наночастинок; вивчена стохастична картина самоорганізації за допомогою флуктуацій основних параметрів системи; побудована статистична картина переходу між різними режимами руху наночастинок; у рамках мікроскопічного підходу досліджені властивості основних параметрів наносистем; проаналізована модель переходу між парамагнітним та магнітовпорядкованим станами нанокластерної системи за механізмом фазового переходу першого роду.

## ЗМІСТ

Вступ .....	7
1 МОДЕЛІ ФОРМУВАННЯ АНСАМБЛЕЙ ТА РУХУ НАНОЧАСТИНОК .....	9
1.1 Типи руху наночастинок .....	9
1.2 Синергетична модель переходу між режимами руху наночастинок ..	10
1.2.1 Колективний рух активних наночастинок . . . . .	10
1.2.2 Опис переривчастого руху . . . . .	14
2 СТАТИСТИЧНА ПОЛЬОВА МОДЕЛЬ НЕАДИТИВНОЇ СИСТЕМИ .....	21
2.1 Неадитивні системи .....	21
2.2 Основні співвідношення польової схеми .....	25
2.3 Еволюція неадитивної системи .....	28
3 МІКРОСКОПІЧНИЙ ПІДХІД В РАМКАХ МОДЕЛІ ІЗІНГА ... ..	39
3.1 Опис неадитивних властивостей .....	39
3.2 Ентропія неадитивних систем .....	40
3.3 Гамільтоніан Ізінга з урахуванням властивості неадитивності .....	43
3.4 Отримання феноменологічної моделі з мікроскопічної .....	47

3.5 Рівноважне значення параметра порядку .....	51
Висновки .....	56
Перелік джерел посилання .....	58

## ВСТУП

Наноструктуровані матеріали є об'єктом зростаючого інтересу для фундаментальної та прикладної науки, оскільки, зі зменшенням характерних розмірів їх структурних одиниць до нанорівня вони часто набувають нових властивостей, що обумовлені квантово-розмірними ефектами і зростаючою роллю поверхневих взаємодій [1–8]. Сучасний інтерес до цієї області фізики твердого тіла, пов'язаний як з принципово новими фундаментальними науковими проблемами і фізичними явищами [9–12], так і з перспективами створення на основі вже відкритих явищ абсолютно нових квантових пристроїв і систем з широкими функціональними можливостями для опто - та наноелектроніки, вимірювальної техніки, інформаційних технологій нового покоління, засобів зв'язку [13].

Більшість наноструктурованих матеріалів утворені так званими нанокластерами (або наночастинками). Серед досліджуваних наночастинок особливе місце займають металеві наночастинки [14, 15], а також їх ансамблі, наприклад, острівкові металеві плівки, розташовані на діелектричних підкладках [16–19]. Як відомо, більшість ефектів у поведінці наночастинок пов'язана з межею поділу фаз, зокрема, термодинамічні умови фазових переходів, неадитивні властивості термодинамічних функцій [20, 21]. Також особливу роль слід відвести колективним ефектам, що відбуваються при формуванні нанокластерів. Одним із способів їх отримання є самоорганізація ансамблю наночастинок [19, 22–26]. Великий інтерес викликають також фазові структурні перетворення в наносистемах. Показано, що нанометрові розміри приводять до стабілізації багатьох нерівноважних структур. Деформоване тверде тіло є системою, в процесі еволюції якої відбувається самоорганізація дисипативних структур, їх перебудова. Ці перебудови можна розглядати як послідовність переходів, при яких випадковість, нерівноважність і незворотність

приводять до порядку в системі.

Із вищезазначеного особливої актуальності набувають теоретичні методи аналізу поведінки наночастинок, що дозволяють прогнозувати еволюцію їх властивостей, колективні процеси самоорганізації наночастинок в нанокласти та наноструктури, режими їх руху.

У першому розділі звіту на основі синергетичної системи рівнянь Лоренца проаналізована модель переходів між прямолінійним, переривчастим та обертальним режимами руху наночастинок. У другому розділі на основі польових методів розвинена статистична теорія складних систем, термодинамічні потенціали яких не мають властивості адитивності. У третьому розділі у рамках теорії середнього поля досліджений фазовий перехід парамагнетик-ферромагнетик в нанокластерних системах для деформованої статсуми.



# 1 МОДЕЛІ ФОРМУВАННЯ АНСАМБЛЕЙ ТА РУХУ НАНОЧАСТИНОК

## 1.1 Типи руху наночастинок

Починаючи з відомої лекції Річарда Феймана "Там, унизу, багато місця", представленої на початку 1960-го року на щорічній зустрічі Американського фізичного товариства, інтерес до наномасштабних об'єктів, їх фізичних властивостей, технічного застосування все більше зростає [27].

Особливо, останнім часом актуальним є дослідження металевих наночастинок, які при нагріванні лазером виконують активний броунівський рух [28–30]. У даному випадку це означає, що частинки можуть здійснювати не тільки випадкові блукання, але також перетворювати внутрішню енергію в енергію руху, в результаті чого виникає активний броунівський рух [31–34].

Попри те, що теоретичні основи броунівського руху описані понад століття назад А. Ейнштейном, деякі спостережувані розбіжності із запропонованою ним теорією вдалося пояснити лише зараз. У роботах [35–44] фізики-теоретики із Лейпцигського університету дослідили неврівноважений броунівський рух нагрітих наночастинок, так званий "гарячий броунівський рух". Коли Ейнштейн розробляв теорію броунівського руху, він виходив із того, що температура броунівської частинки однакова з температурою розчинника, але не розглядав те, як нагріті частинки впливають на оточуючий їх розчинник. Зрозуміло, що досліджуючи можливість керування наночастинами або спостерігаючи за ними за допомогою пучків світла, опис броунівського руху слід провести на новому рівні.

Враховуючи запас внутрішньої енергії після нагрівання лазерним випроміненням, поведінка металевих наночастинок нагадує рух деяких біологічних об'єктів (бактерій, клітин, макромолекул), які добре вивчені експериментально [45]. У вищезгаданій лекції увага Феймана була звернена на незвичайні властивості таких наносистем, які з одного боку мають величезну

кількість інформації, а з іншого боку, можуть виконувати різні дії: переробляти деякі речовини в енергію, здійснювати різні типи руху і т.д. [46]. Відомо [47], що при визначених умовах хаотичного руху, наночастинки можуть утворювати різноманітні постійні, а також змінні у часі структури [48]. Таким чином, проблема моделювання процесів, що відбуваються у нелінійних наносистемах (зокрема рух наночастинок) залишається популярною темою в останні роки [49], але потрібно враховувати не тільки нелінійні ефекти навколишнього середовища, але й зміну параметрів навколишнього середовища.

## 1.2 Синергетична модель переходу між режимами руху наночастинок

### 1.2.1 Колективний рух активних наночастинок

При описі об'єктів неживої природи колективна поведінка (наприклад, атомів конденсованого середовища) зводиться до теорії фазових переходів - феноменологічної, коли цей опис ґрунтується на термодинамічному підході (теорія Ландау), або мікроскопічної, якщо ставиться завдання уявлення колективних ефектів виходячи з поведінки окремих об'єктів (далі будемо називати їх частками). Принципово важливою особливістю теорії фазових переходів є та обставина, що колективна поведінка системи представлена єдиною степеню свободи – гідродинамічною модою, амплітуда якої зводиться до параметра порядку. Це означає, що у великій системі (термостаті) виділяється настільки мала підсистема (її стан визначається параметром порядку), що вона не впливає на стан термостата, який задається термічним параметром (температурою) і механічним (зовнішнім полем). Таким чином, термодинамічна теорія фазових переходів ґрунтується на ієрархії зазначених величин – температура і поле визначають величину параметра порядку, проте його зміна (наприклад, в процесі релаксації) не впливає на стан термостата.

Зовсім інша ситуація складається в самоорганізованих системах: так,

перехід лазера в режим спонтанного випромінювання не може бути представлений єдиним параметром порядку (напруженістю індукованого поля), і для повного розуміння картини випромінювання слід рівноправним чином враховувати електричну поляризацію середовища і різницю заселеності електронних рівнів. З того факту, що перша із зазначених величин відіграє роль спонтанного поля, а друга – температури, слідує важливий висновок про рівноправну роль характеристик підсистеми та навколишнього середовища в процесі самоорганізації (з цієї причини такі системи відносять до відкритих). Більш того, теорема Рюеля – Таккенса стверджує, що мінімальне число параметрів, що дозволяє нетривіальним чином представити картину самоорганізації (наприклад, перехід в режим дивного атрактора) дорівнює трьом.

У роботі [52, 53] була зроблена спроба подання зазначених типів руху, проте розвинена там схема не є самоузгодженою. Це пов'язано з тим, що один з параметрів, що визначають поведінку системи, задається штучним чином (наприклад, внутрішньому параметру надається значення  $\theta = \pm 1$ ). Нами ж досліджується феноменологічна схема, у рамках якої самоорганізація ансамблю активних частинок представлена самоузгодженим чином. Наш підхід ґрунтується на трьохпараметричній системі Лоренца, що відповідає найпростішому польовому поданню самоорганізованого середовища.

Як показує приклад конденсованого середовища, представлення самоорганізованої системи зводиться до самоузгодженого опису часових залежностей параметра порядку, сполученого йому полю та керуючого параметра. Під групою активних частинок будемо мати на увазі систему, центр якої може або бути статичним, або здійснювати поступальний рух. Тоді параметр порядку, що розрізняє ці стани, зводиться до середньої швидкості  $v$  руху системи. Відповідно, сполучене поле представляє собою далекодіючу силу  $f \equiv \nabla h(r, t)$ , а керуючий параметр  $\theta$  характеризує внутрішній стан, що визначає реакцію частинок на цю силу. В результаті задача зводиться до вираження швидкості зміни  $\dot{v}$ ,  $\dot{f}$ ,  $\dot{\theta}$  зазначених величин через їх значення  $v$ ,  $f$ ,  $\theta$  (далі

для простоти розглядається одновимірний випадок).

З огляду на те, що параметр порядку підпорядковує поведінку сили й внутрішнього параметра, запишемо вираз для середнього прискорення в лінійній формі:

$$\tau_v \dot{v} = -v + A_v f. \quad (1.1)$$

Тут перший доданок у правій частині враховує релаксацію швидкості до нульового значення за час  $\tau_v$ , другий доданок описує лінійну реакцію прискорення  $\dot{v}$  на зростання поля  $f$  ( $A_v > 0$  – константа зв'язку).

Запишемо рівняння для сполученого поля у вигляді:

$$\tau_f \dot{f} = -f + A_f v \theta, \quad (1.2)$$

де перший доданок знову має релаксаційну природу з характерним часом  $\tau_f$ , другий являє позитивний зворотний зв'язок середньої швидкості руху і параметра внутрішнього стану зі швидкістю зміни сполученого поля ( $A_f > 0$  – константа зв'язку). Саме цей зв'язок обумовлює наростання сполученого поля, що є причиною самоорганізації.

Останнє рівняння еволюції системи описує релаксацію параметра внутрішнього стану  $\theta$ , що грає роль керуючого параметра:

$$\tau_\theta \dot{\theta} = (\theta_e - \theta) - A_\theta v f. \quad (1.3)$$

На відміну від (1.1) – (1.2) перший доданок в (1.3) описує релаксацію параметра не до нуля, а до кінцевого значення  $\theta_e$ , яке задається зовнішнім впливом ( $\tau_\theta$  – відповідний час релаксації,  $A_\theta > 0$  – константа зв'язку). Згідно (1.3) негативний зворотний зв'язок сполученого поля і швидкості руху зі швидкістю зміни параметра внутрішнього стану приводить, відповідно, до принципу Ле – Шательє, до зменшення цього параметра. Згідно [54] система синергетичних рівнянь (1.1) – (1.3) представляє найпростішу польову схему, що представляє ефект самоорганізації. Для аналізу цієї системи зручно

скористатися безрозмірними змінними, відносячи час  $t$ , швидкість руху  $v$ , спряжене поле  $f$  і параметр внутрішнього стану  $\theta$  до масштабів:

$$t_v, v_c \equiv (A_f A_\theta)^{-1/2}, f_c \equiv (A_v^2 A_f A_\theta)^{-1/2}, \theta_c \equiv (A_v A_f)^{-1}. \quad (1.4)$$

Тоді поведінка групи активних частинок представляється безрозмірною системою рівнянь:

$$\dot{v} = -v + f, \quad (1.5)$$

$$\sigma \dot{f} = -f + v\theta, \quad (1.6)$$

$$\delta \dot{\theta} = (\theta_e - \theta) - vf, \quad (1.7)$$

де введені відношення характерних часів:

$$\sigma \equiv \frac{\tau_f}{\tau_v}, \delta \equiv \frac{\tau_\theta}{\tau_v}. \quad (1.8)$$

Монотонний режим самоорганізації реалізується, коли час релаксації швидкості  $\tau_v$  набагато перевершує масштаби зміни сполученого поля  $\tau_f$  та керуючого параметра  $\tau_\theta$  [54]:

$$\sigma, \delta \ll 1. \quad (1.9)$$

Оскільки безрозмірні швидкості  $\dot{v}$ ,  $\dot{f}$ ,  $\dot{\theta}$  мають однаковий порядок, то умови (1.9) дозволяють знехтувати лівими частинами рівнянь (1.6) – (1.7), які приводять до співвідношень:

$$f = \theta_e \frac{v}{1 + v^2}, \theta = \frac{\theta_e}{1 + v^2}. \quad (1.10)$$

Таким чином, спонтанне зростання середньої швидкості в інтервалі, обмеженому максимальним значенням  $v_c$ , приводить до наростання сполученого поля  $f$  і спадання параметра внутрішнього стану  $\theta$  до значення  $\theta_e/2$ , що фіксується зовнішнім впливом.

Підстановка першого з рівностей (1.10) у (1.5) дає рівняння Лан-

дау-Халатнікова:

$$v = -\frac{\partial E}{\partial v}, \quad (1.11)$$

вид якого визначається кінетичною енергією руху:

$$E = -\frac{v^2}{2} + \frac{\theta_e}{2} \ln(1 + v^2), \quad (1.12)$$

вимірної в одиницях  $v_c^2$ . При малих значеннях параметра внутрішнього стану  $\theta_e$  залежність  $E(v)$  має монотонно зростаючий вигляд з мінімумом  $v = 0$ , який відповідає спокою центру мас групи. Зі зростанням  $\theta_e$  до значень, що перевищують критичний рівень  $\theta_c$ , з'являється мінімум:

$$v_0 = \sqrt{\theta_e - 1}, \quad (1.13)$$

який відповідає поступальному руху, що відповідає впорядкованому стану. При цьому сполучене поле набуває кінцевого значення  $f_0 = v_0$ , а параметр внутрішнього стану зменшується до критичного значення  $\theta_0 = 1$ . Проведене дослідження показує, що використання системи (1.1) – (1.3) дозволяє уявити самоузгоджену картину спонтанного переходу групи активних частинок у режим поступального руху.

### 1.2.2 Опис переривчастого руху

Істотна особливість картини самоорганізації, викладеної в попередньому підрозділі, полягає в тому, що всі величини, що входять у рівняння (1.5) – (1.7), характеризують поведінку групи частинок у цілому. Це означає, що вони представляють значення, усереднені за обсягом системи, для детального опису якої слід врахувати флуктуації швидкості, сполученого поля і параметра внутрішнього стану. З цією метою додамо в праві частини системи (1.5)

– (1.7) стохастичні джерела  $\sqrt{I_v}\eta(t)$ ,  $\sqrt{I_f}\eta(t)$ ,  $\sqrt{I_\theta}\eta(t)$ , визначені інтенсивностями  $I_v, I_f, I_\theta$ , вимірними в одиницях  $(A_f A_\theta)^{-1}$ ,  $(A_v^2 A_f A_\theta)^{-1}$ ,  $(A_v A_f)^{-2}$ , відповідно; множник  $\eta(t)$  представляє білий шум, який визначається рівністю:

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \langle \eta(t), \eta(t') \rangle = \delta(t - t'),$$

де кутові дужки означають усереднення. Тоді в рамках адіабатичного наближення (1.9) спряжене поле  $f(t)$  і параметр внутрішнього стану  $\theta(t)$  приймають стохастичний вид:

$$f(t) = \bar{f} + \tilde{f}\eta(t), \theta(t) = \bar{\theta} + \tilde{\theta}\eta(t), \quad (1.14)$$

де детерміністичні та випадкові складові мають вигляд:

$$\bar{f} \equiv \theta_e v d(v), \tilde{f} \equiv \sqrt{I_f + I_\theta v^2} d(v); \quad (1.15)$$

$$\bar{\theta} \equiv \theta_e d(v), \tilde{\theta} \equiv \sqrt{I_\theta + I_f v^2} d(v); d(v) \equiv (1 + v^2)^{-1}. \quad (1.16)$$

Перші з цих виразів зводяться до рівності (1.10), а другі слідує з відомої властивості адитивності дисперсій гаусовських випадкових величин [54]. Залежність інтенсивностей шумів  $\tilde{f}, \tilde{\theta}$  від параметра порядку  $v$  означає, що синергетичний принцип підпорядкування перетворює адитивні шуми сполученого поля  $f$  і параметра внутрішнього стану  $\theta$  у мультиплікативні. В результаті вираз (1.5), доповнений стохастичною складовою (1.14), приводить до рівняння Ланжевена:

$$\dot{v} = F(v) + \sqrt{I(v)}\eta(t), F(v) \equiv -\frac{\partial E}{\partial v} = -v + \frac{v\theta_e}{1 + v^2}, \quad (1.17)$$

де ефективна сила  $F$  задається енергією  $E$ , яка визначається виразом (1.12), а ефективна інтенсивність шуму виражається рівністю:

$$I(v) \equiv I_v + (I_f + I_\theta v^2)d^2(v), \quad (1.18)$$

яка слідує із зазначеної властивості адитивності інтенсивностей шумів. Щоб уникнути непорозумінь слід зазначити, що підстановка рівності (1.14) – (1.16) у (1.5) приводить до стохастичної добавки:

$$\left[ I_v^{1/2} + \left( I_f^{1/2} + I_\theta^{1/2} v \right) d(v) \right] \eta(t), \quad (1.19)$$

квадрат амплітуди якої відрізняється від ефективної інтенсивності шуму (1.18). Більш того, безпосереднє використання адіабатичного наближення в рівняннях (1.6), (1.7) дає флуктуаційні добавки залежностей (1.14) у вигляді  $\tilde{f} \equiv \left( I_f^{1/2} + I_\theta^{1/2} v \right) d(v)$ ,  $\tilde{\theta} \equiv \left( I_\theta^{1/2} - I_f^{1/2} v \right) d(v)$ , який відрізняється від виразів (1.15), (1.16). Остання з цих добавок має явно нефізичну форму, оскільки дає повну компенсацію флуктуацій параметра внутрішнього стану  $\theta$  при швидкості  $v = \sqrt{I_\theta/I_f}$ . Формальною причиною зазначеного протиріччя є непридатність звичайних методів аналізу до рівняння Ланжевена (див. [54]). Рівняння Ланжевена (1.17) має набір випадкових рішень, розподіл за якими задається рівнянням Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} \left\{ -F(v)P(v, t) + \frac{\partial}{\partial v} [I(v)P(v, t)] \right\}. \quad (1.20)$$

У стаціонарному стані ймовірність розподілу за значеннями швидкості  $P(v, t)$  не залежить від часу, і вираз, що стоїть у фігурних дужках правої частини (1.20), зводиться до нуля. В результаті приходимо до стаціонарного розподілу:

$$P(v) = \frac{Z^{-1}}{I(v)} \exp\{-U(v)\}, \quad (1.21)$$

де  $Z$  – нормована константа. Ефективна енергія:

$$U(v) = - \int_0^v \frac{F(v')}{I(v')} dv', \quad F \equiv - \frac{\partial E}{\partial v}, \quad (1.22)$$

визначається значеннями (1.17), (1.18) сили й інтенсивності шуму.

Рівняння, що визначає положення екстремумів розподілу  $P(v)$ , має



вигляд:

$$x^3 - \theta_e x^2 - 2I_\theta x + 4(I_\theta - I_f) = 0, x \equiv 1 + v^2. \quad (1.23)$$

Звідси випливає, що вид розподілу  $P(v)$  не залежить від інтенсивності  $I_v$  флуктуацій швидкості, але істотно залежить від параметра внутрішнього стану  $\theta_e$ , певного зовнішнім впливом, та інтенсивностей шумів  $I_f, I_\theta$  сполученого поля і параметра внутрішнього стану. Тому далі можна покласти  $I_v = 0$ . Розподіл (1.21) має максимум в точці  $v = 0$ , якщо параметр внутрішнього стану  $\theta_e$ , що задається зовнішнім впливом, не перевищує критичне значення:

$$\theta_c^0 = 1 + 2I_\theta - 4I_f, \quad (1.24)$$

яке зростає зі збільшенням інтенсивності флуктуацій параметра внутрішнього стану і зменшується з ростом інтенсивності флуктуацій сполученого поля. Така ситуація відповідає оберտальному режиму руху системи, при якому її центр ваги спочиває.

Умови поступального руху легко знайти при  $I_f = 0$ , коли швидкість руху приймає значення:

$$v_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[ \theta_e - 3 + \sqrt{(3 - \theta_e)^2 + 4(2\theta_e - 3 + 2I_\theta)} \right], \quad (1.25)$$

які слудують з (1.23) після виключення кореня  $v^2 = 0$ . Мінімальна величина цієї швидкості:

$$v_c^2 = \frac{1}{2} \left[ (\theta_e - 3) - \sqrt{(\theta_e + 7)(\theta_e - 1)} \right] \quad (1.26)$$

досягається на прямій (1.24), де  $I_f = 0$ . При  $\theta_e < 4/3$  корені  $v_c$  є комплексними, а при  $\theta_e > 4/3$  – дійсними, причому  $v_+ = -v_-$ . Таким чином, у трикритичній точці:

$$\theta_e = 4/3, I_\theta = 1/6 \quad (1.27)$$

виникає поступальний рух, при якому розподіл швидкостей має максимуми у симетричних точках  $v_\pm$ .

Знайдемо умови існування коренів  $v_{\pm}$ . Вважаючи дискримінант рівняння (1.23) рівним нулю, одержимо вирази:

$$I_{\theta} = 0, I_{\theta}^2 - I_{\theta} \left[ \frac{27}{2} \left( 1 - \frac{\theta_e}{3} \right) - \frac{\theta_e^2}{8} \right] + \frac{\theta_e^3}{2} = 0, \quad (1.28)$$

останнє з яких дає залежність:

$$2I_{\theta} = \left[ \frac{27}{2} \left( 1 - \frac{\theta_e}{3} \right) - \frac{\theta_e^2}{8} \right] \pm \left\{ \left[ \frac{27}{2} \left( 1 - \frac{\theta_e}{3} \right) - \frac{\theta_e^2}{8} \right]^2 - 2\theta_e^3 \right\}^{1/2}. \quad (1.29)$$

Вона відповідає  $\theta_e(I_p)$  колоколообразній кривій, яка перетинає горизонтальну вісь в точках  $I_{\theta} = 0$  і  $I_{\theta} = 27/2$  та має максимум у точці:

$$\theta_e = 2, I_{\theta} = 2. \quad (1.30)$$

При  $I_f = 0$  ця крива дотикається до прямої (1.24) у точці (1.27).

На рисунку 1.1 а показана фазова діаграма можливих режимів поведінки групи активних частинок при різних значеннях параметра внутрішнього стану  $\theta_e$  та  $I_{\theta}$  інтенсивності його флуктуацій (флуктуації сполученого поля  $I_f = 0$ ). З діаграми видно, що при значеннях  $\theta_e$ , що перевищують границю (1.24), найбільш ймовірна величина швидкості  $v \neq 0$ , і група активних частинок робить поступальний рух. При зниженні  $\theta_e$ , з'являється максимум в точці  $v = 0$ , що відповідає обертальному руху. Під кривою (1.29) цей максимум стає єдиним. При наявності флуктуацій сполученого поля  $I_f \neq 0$  координати (1.27) трикритичній точці приймають вид:

$$\theta_e = \frac{4}{3}(1 - I_f), I_{\theta} = \frac{1}{6}(1 + 8I_f), \quad (1.31)$$

а положення критичної точки (1.31) змінюється більш складним чином.

Порівняння рисунків 1.1 а, 1.1 б, 1.1 в показує, що флуктуації сполученого поля пригнічують обертальний рух: з їх зростанням до значення  $I_f = 0$  трикритичної точки (1.31) потрапляє на вісь  $\theta_e = 0$ , а при  $I_f = 2$  область

обертального руху зникає зовсім. З іншого боку, фазова діаграма показує, що флуктуації  $I_\theta$  параметра внутрішнього стану приводять до появи двофазного стану, в якому система здійснює переривчастий рух – її центр мас по чергово здійснює поступальний рух або покоїться.

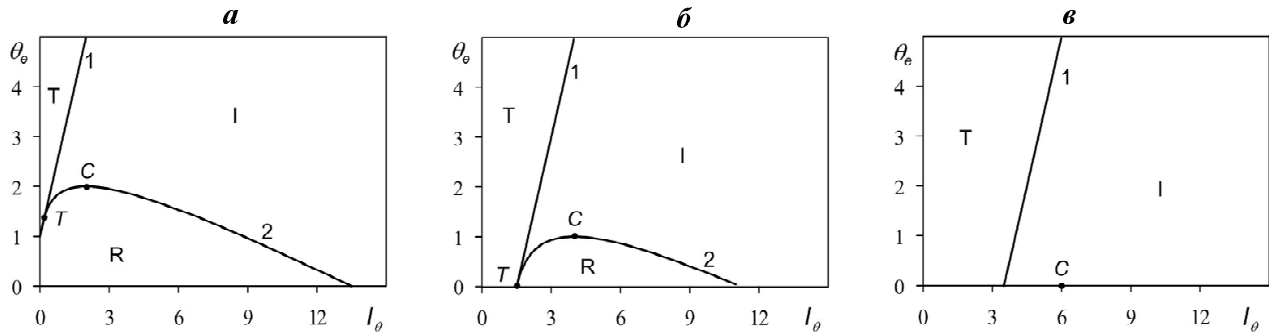


Рисунок 1.1 – Діаграма можливих режимів поведінки групи активних частинок при різних значеннях параметра внутрішнього стану  $\theta_e$ , його флуктуацій  $I_\theta$  і флуктуацій сполученого поля  $I_f$  (діаграми а, б, в відповідають значенням  $I_f = 0, 1, 2$ ). Криві 1, 2 вказують границю областей поступального Т і обертального R руху; 1 – область переривчастого руху

Згідно рисунку 1.1 а такий режим може досягатися навіть під час відсутності зовнішнього впливу ( $\theta_e = 0$ ), коли інтенсивність флуктуацій  $I_\theta$  перевищує критичне значення  $I_0^c = 27/2$ , що спадає до  $I_0^c = 2(I_f - 1/4)$  при  $I_f > 2$ . В результаті система переходить в режим само організованої критичності [54,55], в якому розподіл швидкості (1.21), яке визначається ефективною енергією (1.22) у межах  $I_\theta, I_v, I_f$ , набирає вигляду:

$$P(v) \simeq I_\theta^{-1} \left( \frac{1+v^2}{v} \right)^2 \exp \left\{ I_\theta^{-1} \int \frac{F(v) (1+v^2)^2}{v^2} dv \right\} \sim \frac{I_\theta^{-1}}{v^2}. \quad (1.32)$$

Таким чином, наростання флуктуацій параметра внутрішнього стану приводить до самоподібного режиму, що характеризується однорідною функцією з показником 2.

Згідно рисунку 1.2, в залежності від значень параметра зовнішнього впливу  $\theta_e$  і рівня флуктуацій  $I_\theta, I_f$ , функція розподілу швидкості  $P(v)$  може приймати різний вигляд. При попаданні системи в область обертального руху, позначену на рисунку 1.1 буквою R, найбільш ймовірними будуть малі

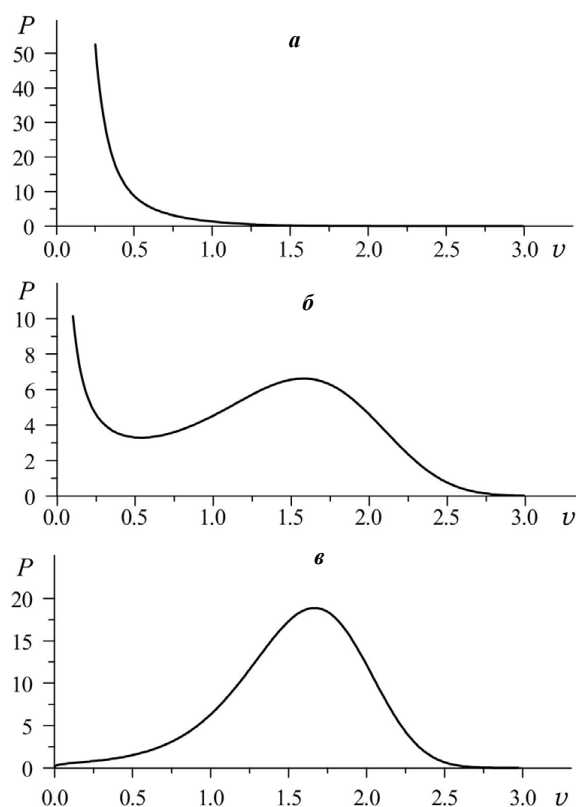


Рисунок 1.2 – Функція розподілу швидкості активних частинок: а – обертальний рух ( $\theta_e = 0.1, I_\theta = 1.1$ ); б – переривчастий рух ( $\theta_e = 3, I_\theta = 2$ ); в – поступальний рух ( $\theta_e = 3.5, I_\theta = 1.1$ )

швидкості, розподілені відповідно до рисунку 1.1. Бімодальний режим, показаний на рисунку 1.2 б, являє переривчастий рух, що відповідає області І на рисунку 1.1. І нарешті, одномодовий режим (рисунку 1.2 в), в якому найбільш вірогідні кінцеві значення швидкості, характерний для поступального руху в області Г.

Таким чином, проведенне дослідження показує, що введення стохастичних джерел у систему Лоренца (1.5) – (1.7) дозволяють представити основні особливості переривчастого руху групи активних частинок.

## 3 СТАТИСТИЧНА ПОЛЬОВА МОДЕЛЬ НЕАДИТИВНОЇ СИСТЕМИ

Як відомо, між будь-якими двома нейтральними атомами або молекулами, які знаходяться на більших (у порівнянні з їх власними розмірами), відстанях, діють Ван дер Ваальсові сили [56]. Ці сили мають далекодіючий характер: вони зменшуються з відстанню за степеневим (а не експоненціальним) законом. За своїм походженням Ван дер Ваальсові сили мають електромагнітний характер. Вони отримуються, як було вперше продемонстровано Ф. Лондоном, у другому наближенні теорії збурення [57].

У конденсованих тілах сусідство атомів істотно змінює властивості їх електронних оболонок, а наявність між взаємодіючими атомами деякого середовища впливає на електромагнітне поле, через яке відбувається взаємодія.

Основна ідея побудови польової моделі полягає у тому, що взаємодія між наночастинками розглядається як така, що здійснюється через флуктуаційне електромагнітне поле. Поряд з силами тяжіння між наближеними частинками, з цієї ж точки зору можуть бути розглянуті й інші ефекти по аналогії з конденсованими тілами. В усіх цих ефектах у термодинамічному відношенні проявляється одна загальна риса – усі вони пов'язані з неадитивністю вільної енергії системи. Вказану неадитивність можна легко зрозуміти, звернувшись до згаданого зв'язку між Ван дер Ваальсовими силами та флуктуаціями електромагнітного поля. Тому пов'язана з флуктуаціями частина вільної енергії не визначається властивостями речовини тільки у цій точці, тобто неадитивна.

### 2.1 Неадитивні системи

Статистична фізика ґрунтується, як відомо, на припущенні про перемішування фазового простору [58]. Згідно з цим припущенням в ході еволюції

виділений об'єм швидко стискається за одними напрямками й розширюється за іншими, набуваючи з часом настільки розгалужену форму, що його точки можна знайти в будь-якій кінцевій частині фазового простору. Додаючи припущення про нескінченне число степенів свободи гіпотези перемішування, приходимо до розподілу Гіббса, з якого слідує властивість адитивності термодинамічних потенціалів. При цьому виконуються наступні умови [59]:

- кінетична – перемішування відбувається експоненційно швидко (це забезпечує добре розвинену хаотичну структуру і вимагає позитивності найбільшого з показників Ляпунова);
- динамічна – всі сили, включаючи ті, що забезпечують мікроскопічну пам'ять, є короткодійними (в результаті стохастичний процес має марківський характер);
- геометрична – фазовий простір має незвичайні властивості безперервності, гладкості, евклідової й т.і.

Останнім часом виявлено безліч фізичних систем, які демонструють неадитивну поведінку. До них відносяться феромагнетики, спінові стекла, двовимірні електронна плазма в турбулентному режимі, системи з аномальною дифузією Леві, гранульовані системи, тверді тіла, що піддаються іонному бомбардуванню, гравітаційні системи, елементарні частинки, що зіштовхуються з високою енергією, квантові системи, що проявляють ефекти заплування, та багато інших. У таких системах експоненційно швидке перемішування набуває степеневого характеру, в результаті чого відбувається тільки слабка хаотизація фазового простору. Крім того, цим системам властиві ефекти далекодії, мультифрактальні граничні або патологічні початкові умови, деякі спеціальні механізми дисипації й т.і.

З формальної точки теорія неадитивних систем ґрунтується на деформації логарифмічної та експоненційної функцій, яка модифікує ентропію Больцмана-Гіббса таким чином, що функція розподілу набуває або да-

лекодуючі степеневі асимптотики [60–63, 63–67], або одрізається на кінцевих значеннях енергії [68, 69]. Характерною особливістю неадитивних систем є самоподібність їх фазового простору, об'єм якого залишається незмінним при деформації, що комбінує зменшення (збільшення) координати та збільшення (зменшення) імпульсу.

З іншого боку, деформація основних співвідношень квантової теорії дозволяє описати нетривіальні фізичні об'єкти [70]. Цей опис заснований на формалізмі квантових груп, який зводиться до так званого  $q$ -обчислення [71–73], що було вперше введено Хейне і Джексоном [74, 75] при вивченні базово-деформованих гіпергеометричних рядів [76, 77]. З математичної точки зору  $q$ -обчислення представляє найбільш зручний формалізм для опису мультифрактальних множин, які утворюються в результаті багаторазові дії оператора дилатації, що визначає похідну Джексона. Більш того, виявляється [62, 77], що для  $q$ -деформованих бозонів і ферміонів, природне узагальнення термостатистики засноване на  $q$ -обчисленні, а стаціонарне рішення деформованого рівняння Фоккера-Планка являє  $q$ -аналог експоненційної функції в уявленні базово-деформованих гіпергеометричних рядів [78, 79]. Такого роду системи виявляють дискретну масштабну інваріантність [79], опис якої [80] можливий при використанні похідної та інтеграла Джексона. Наприклад, вільна енергія спінових систем, визначених на ієрархічній решітці, зводиться до однорідної функції, що являє собою  $q$ -інтеграл [81].

Але найбільш актуальний приклад застосування статистичної теорії неадитивних систем – це опис об'єктів кінцевого розміру, важливість дослідження яких зростає з розвитком нанотехнологій. Дійсно, при кінцевому числі частинок параметр неадитивності приймає значення [82]:

$$q = \left(1 - \frac{\alpha}{d} N^{-1}\right), \quad (2.1)$$

де  $\alpha$  – показник подібності координатної залежності гамільтоніана (наприклад, для гармонічного осцилятора  $\alpha = 2$ );  $d$  – розмірність системи. Короткодійчі потенціали ( $\alpha > 0$ ) характеризуються значеннями  $q \geq 1$ , а далекодійчі ( $-d \leq \alpha \leq 0$ ) відповідає величина  $q \leq 1$  (при  $\alpha < -d$  застосовується статистика Больцмана-Гіббса) [81–83]. Для термодинамічної межі  $N \rightarrow \infty$  отримуємо значення  $q = 1$ , яке відповідає звичайній статистиці, а зі зменшенням числа частинок  $N$  різниця  $|q - 1|$  зростає, досягаючи максимальної величини  $\alpha/(d - \alpha)/$  при  $\alpha > 0$  й  $\alpha/(d + |\alpha|)$  при  $\alpha < 0$ .

Розглянуті неадитивні стаціонарні системи в рамках польового формалізму, який, ґрунтуючись на використанні методів теорії поля, являє собою один з найбільш потужних інструментів дослідження [84, 85]. Формальною основою стандартної польової схеми є, як відомо, генеруючий функціонал, який представляє узагальнене перетворення Фур'є-Лапласа, що дає перехід від розподілу флуктуаційного параметра порядку (амплітуди гідродинамічної моди, що задає різні стани ансамблю наночастинок) до допоміжного поля [86]. Завдяки експонентному характеру цього перетворення визначення кореляторів параметра порядку досягається диференціюванням генеруючого функціоналу за вказаним полем.

Представлена схема стає неспроможною при переході до неадитивних статистичних систем, оскільки експонента Больцмана-Гіббса набуває біноміальної форми Цалліса. В результаті побудова генеруючого функціоналу вимагає деформації перетворення Фур'є-Лапласа, а замість звичайного диференціювання слід використовувати оператор, щодо якого інваріантно ядро деформованого перетворення [87]. Так, наприклад, при побудові статистичної теорії самоподібно розподілених полів роль базисної функції відіграє степенева залежність, для якої генеруючий функціонал зводиться до перетворення Мелліна статистичного функціонала, а оператор диференціювання являє собою похідну Джексона [88–96].



## 2.2 Основні співвідношення польової схеми

Представимо поведінку стохастичної системи (ансамблю наночастинок) просторово-часовою залежністю  $x(r, t)$  амплітуди гідродинамічної моди, середнє значення якої зводиться до параметра порядку, що характеризує стан системи (наприклад, концентрацію наночастинок). Для опису цієї залежності будемо виходити з рівняння Ланжевена [89]:

$$\dot{x}(r, t) - D\nabla^2 x = -\gamma \frac{\partial F}{\partial x} + \zeta(r, t). \quad (2.2)$$

Тут точка означає похідну за часом, оператор  $\nabla \equiv \partial/\partial r$ ;  $D$  – параметр неоднорідності;  $\gamma$  – кінетичний коефіцієнт;  $F(x)$  – вільна енергія;  $\zeta(r, t)$  – стохастична добавка, яка визначається умовами білого шуму:

$$\langle \zeta(r, t) \rangle = 0, \langle \zeta(r, t) \zeta(0, 0) \rangle = \gamma T \delta(r) \delta(t), \quad (2.3)$$

де кутові дужки означають усереднення за розподілом Гауса величини  $\zeta$ ,  $T$  – температура, яка задає інтенсивність шуму.

Далі зручно ввести одиниці виміру  $(\gamma T)^2/D^3$ ,  $\gamma T/D$ ,  $D^3/\gamma^3 T^2$ ,  $D^3/(\gamma T)^2$  для часу  $t$ , координати  $r$ , густини термодинамічного потенціалу  $F$  і стохастичної змінної  $\zeta$  (при цьому мається на увазі, що амплітуда гідродинамічної моди  $x$  з самого початку прийнята безрозмірною).

В результаті рівняння руху (2.3) набуває вигляду:

$$\dot{x}(r, t) = -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} + \zeta(r, t), \quad (2.4)$$

де використана скорочена форма запису варіаційної похідної:

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} \equiv \frac{\delta \mathcal{F}\{x(r, t)\}}{\delta x(r, t)} = \frac{\delta \mathcal{F}(x)}{\delta x} - \nabla^2 x, \mathcal{F}(x) \equiv \int \left[ F(x) + \frac{1}{2}(\nabla x)^2 \right] dr. \quad (2.5)$$

Крім того, у (2.3) зникає коефіцієнт  $\gamma T$ , а розподіл змінної  $\zeta$  набуває стан-

дартну гаусову форму:

$$P_0\{\zeta\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \int \zeta^2(r, t) dr dt\right). \quad (2.6)$$

Статистична теорія поля ґрунтується на методі генеруючого функціонала:

$$\mathcal{Z}\{u(r, t)\} = \int \mathcal{Z}\{x\} \exp\left(\int u x dr dt\right) \{\delta x\}, \{\delta x\} \equiv \prod_{r, t} \delta x(r, t), \quad (2.7)$$

який представляє функціональне перетворення Лапласа узагальненої статистичної суми:

$$\mathcal{Z}\{x(r, t)\} \equiv \left\langle \prod_{(r, t)} \delta \left\{ \dot{x} + \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} - \zeta \right\} \det \left| \frac{\delta \zeta}{\delta x} \right| \right\rangle. \quad (2.8)$$

У її визначенні  $\delta$  - функціонал враховує рівняння Ланжевена (2.4), а детермінант визначає перехід від континуального інтегрування по  $\zeta$  до  $x$ .

Варіювання генеруючого функціоналу (2.7) за пробним полем  $u(r, t)$ , дозволяє знайти корелятори спостережуваної величини  $x(r, t)$ :

$$\langle x(r_1, t_1) \mathcal{K} x(r_n, t_n) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}\{u=0\}} [\mathcal{D}_{u(r_1, t_1)} \mathcal{K} \mathcal{D}_{u(r_n, t_n)}] \mathcal{Z}\{u(r, t)\}|_{u(r, t)=0}, \quad (2.9)$$

де  $\mathcal{Z}\{0\} \equiv \mathcal{Z}\{u(r, t) = 0\}$ ,  $\mathcal{D}_{u(r, t)} \equiv \frac{\delta}{\delta u(r, t)}$ .

З урахуванням тотожності  $N$  частинок, що складають систему, статистична сума визначається виразом:

$$Z_N = \frac{1}{N!} \mathcal{Z}\{0\} = \frac{1}{N!} \int \mathcal{Z}\{x(r, t)\} (\delta x). \quad (2.10)$$

Крім кореляторів спостережуваних величини, використання генеруючого функціоналу (2.7) дозволяє простежити за еволюцією найбільш ймовірних значень стохастичної змінної  $x$  та її дисперсії. З цією метою представимо

$\delta$  - функціонал в (2.8) функціональним розкладанням Лапласа:

$$\delta\{x(r, t)\} = \int_{-i\infty}^{i\infty} \exp\left(-\int p x d r d t\right) \{\delta p\}, \quad (2.11)$$

за полем  $p(r, t)$ , фізичний зміст якого буде встановлено нижче.

Тоді після усереднення за розподілом (2.6) статистичний функціонал (2.8) набуває стандартного вигляду:

$$\mathcal{Z}\{x(r, t)\} = \int \exp[-S\{x(r, t), p(r, t)\}] \{\delta p\}, \quad (2.12)$$

де ефективна дія  $S = \int \mathcal{L} d t$  визначається лагранжіаном:

$$\mathcal{L} = p \left( \dot{x} + \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} \right) - \frac{p^2}{2}, \quad \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} \equiv -f - \nabla^2 x, \quad f \equiv -\frac{\delta F}{\delta x}. \quad (2.13)$$

Далі використовується рівняння Ейлера:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} - \frac{d}{d t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla x} + \nabla^2 \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla^2 x} = \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \dot{x}}, \quad x \equiv \{x, p\}, \quad (2.14)$$

з дисипативною функцією  $\mathcal{R} = \frac{1}{2} \dot{x}$  [96]. У результаті одержимо рівняння для найбільш ймовірних значень статистичних полів  $x(r, t)$ ,  $p(r, t)$ :

$$\dot{x} - \nabla^2 x = f + p, \quad (2.15)$$

$$\dot{p} + \dot{x} + \nabla^2 p = -f' p, \quad (2.16)$$

де штрих означає диференціювання за  $x$ . Порівняння рівняння (2.15), записаного у вигляді  $\dot{x} = -\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} + p$ , з виразом (2.4) показує, що поле  $p(r, t)$  представляє найбільш імовірні значення амплітуди флуктуацій  $\zeta(r, t)$  сполученої сили  $f$ .

### 2.3 Еволюція неадитивної системи

Порівняння деформованої  $\delta$  – функції зі стандартним функціональним поданням (2.11) показує, що з точністю до заміни числа  $k$  на комплексне поле  $ip(r, t)$  ці вирази мають однакову форму.

Функціонал:

$$Z_q\{x(r, t)\} = \frac{2\pi}{2-q} \int \exp[-S_q x(r, t), p(r, t)] \delta p \quad (2.17)$$

відрізняється від стандартного подання (2.12) несуттєвим множником і заміною звичайної експоненти на деформовану. В результаті деформація статистичної системи не впливає на форму лагранжіана (2.13). Тому варіювання функціонала (2.17) приводить до тих же рівнянь еволюції (2.15), (2.16), що і для адитивної системи.

Таким чином, деформація фазового простору не змінює форму траєкторій, за якими протікає еволюція неадитивної системи.

Визначимо густину вільної енергії розкладу Ландау:

$$F = \frac{\varepsilon}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4, \quad (2.18)$$

з безрозмірною температурою  $\varepsilon$ , що відрахована від точки перетворення; крім того, градієнтні складові  $\nabla^2 x$  й  $\nabla^2 p$  апроксимуються лінійними функціями  $x/\xi^2$  та  $p/\lambda^2$  з масштабами  $\xi$  та  $\lambda$ . В результаті система (2.15) – (2.16) набуває вигляду:

$$\dot{x} = - [(\varepsilon - \xi^{-2}) + x^2] x + p, \quad (2.19)$$

$$\dot{p} + \dot{x} = [(\varepsilon - \lambda^{-2}) + 3x^2] p. \quad (2.20)$$

Оскільки рівняння (2.19) – (2.20) симетричні щодо одночасного обернення знаків змінних  $x$  та  $p$ , то відповідні їм фазові портрети (рисунок 2.1) мають центрально симетричну форму.

З рисунку 2.1 а видно, що при сильній неоднорідності флуктуацій сполученої сили вище точки переходу, коли виконуються умови  $0 < \varepsilon < \lambda^{-2}$ , реалізується стійкий вузол  $O$ , розташований на початку координат  $x_0 = 0$ ,  $p_0 = 0$ , і два центрально симетричних сідла  $S_{1,2}$ . Очевидно, така картина відповідає однорідному неупорядкованому стану фізичної системи. З ослабленням неоднорідності в розподілі флуктуацій до такої степені, що порушується нерівність  $\varepsilon < \lambda^{-2}$ , і з посиленням неоднорідності розподілу параметра порядку, що забезпечує умову  $\varepsilon < \xi^{-2}$ , сідла  $S_{\pm}$  (рисунок 2.1 б) симетрично зміщуються на вісь абсцис, а вузол  $O$  трансформується у фокус. Доречно припустити, що така ситуація являє собою еволюцію неупорядкованої фізичної системи через стадію гетерофазних флуктуацій. І нарешті, з розмиттям просторових розподілів амплітуди флуктуацій і параметра порядку, коли одночасно виконуються нерівності  $\varepsilon < \lambda^{-2}$ ,  $\varepsilon < \xi^{-2}$ , відбувається зворотна біфуркація двох сідел  $S_{\pm}$  та вузла  $O$  в сідло  $S$ , розташоване на початку координат. Згідно рисунку 2.1 в, такий випадок не відповідає якомусь стаціонарному стану.

Перехід до впорядкованої фази  $\varepsilon < 0$  (рисунок 2.1 г – е) забезпечує виконання умов  $\varepsilon < \lambda^{-2}$ ,  $\varepsilon < \xi^{-2}$  за яких можливі конфігурації фазових портретів визначаються наявністю п'яти особливих точок – сідла  $S$ , розташованого на початку координат, центрально симетричних стійких вузлів/фокусів  $N_{1,2}/F_{1,2}$  та пари сідел  $S_{\pm}$ , симетрично розташованих на осі абсцис.

Згідно з рисунком 2.1 г, розмиття неоднорідності параметра порядку внаслідок зростання масштабу  $\xi$  приводить до ослаблення коливального режиму поблизу стаціонарних станів  $N_{1,2}/F_{1,2}$ , а розмиття неоднорідності розподілу флуктуацій внаслідок збільшення масштабу  $\lambda$  (рисунок 2.1 д) підсилює його. У явному вигляді вплив масштабів  $\xi$ ,  $\lambda$ , визначається показниками

Ляпунова:

$$\lambda_{1,2} = -(\alpha + \beta) \pm \sqrt{\beta^2 - \alpha - 6x_0p_0},$$

$$\alpha \equiv (\varepsilon - \xi^{-2}) + 3x_0^2, \quad \beta \equiv \frac{1}{2} (1 + \xi^{-2} + \lambda^{-2}),$$

Перехід до впорядкованої фази  $\varepsilon < 0$  (рисунок 2.1 г – е) забезпечує виконання умов  $\varepsilon < \lambda^{-2}, \varepsilon < \xi^{-2}$ , за яких можливі конфігурації фазових портретів визначаються наявністю п'яти особливих точок – сідла  $S$ , розташованого на початку координат, центрально симетричних стійких вузлів / фокусів  $N_{1,2}/F_{1,2}$  та пари сідел  $S_{\pm}$ , симетрично розташованих на осі абсцис.

Згідно з рисунком 2.1 г, розмиття неоднорідності параметра порядку внаслідок зростання масштабу  $\xi$  приводить до ослаблення коливального режиму поблизу стаціонарних станів  $N_{1,2}/F_{1,2}$ . Розмиття неоднорідності розподілу флуктуацій внаслідок збільшення масштабу  $\lambda$  (рисунок 2.1 е) посилює його. У явному вигляді вплив масштабів  $\xi, \lambda$  визначається показниками Ляпунова:

$$\lambda_{1,2} = -(\alpha + \beta) \pm \sqrt{\beta^2 - \alpha - 6x_0p_0},$$

$$\alpha \equiv (\varepsilon - \xi^{-2}) + 3x_0^2, \quad \beta \equiv \frac{1}{2} (1 + \xi^{-2} + \lambda^{-2}),$$
(2.21)

де  $x_0, p_0$  - координати особливих точок.

Як уже зазначалося, деформація неадитивної статистичної системи не змінює вигляд фазових портретів.

Доведемо, що вона істотно позначається на ймовірності реалізації фазових траєкторій:

$$P_q \{p(x)\} = Z_q^{-1} \exp_q [-S \{p(x)\}].$$
(2.22)

Тут ефективна дія  $S \{p(x)\} = S_{min} \{x(r, t), p(r, t)\}$  приймає мінімальні значення, що відповідають оптимальним фазовим траєкторіям еволюції системи,

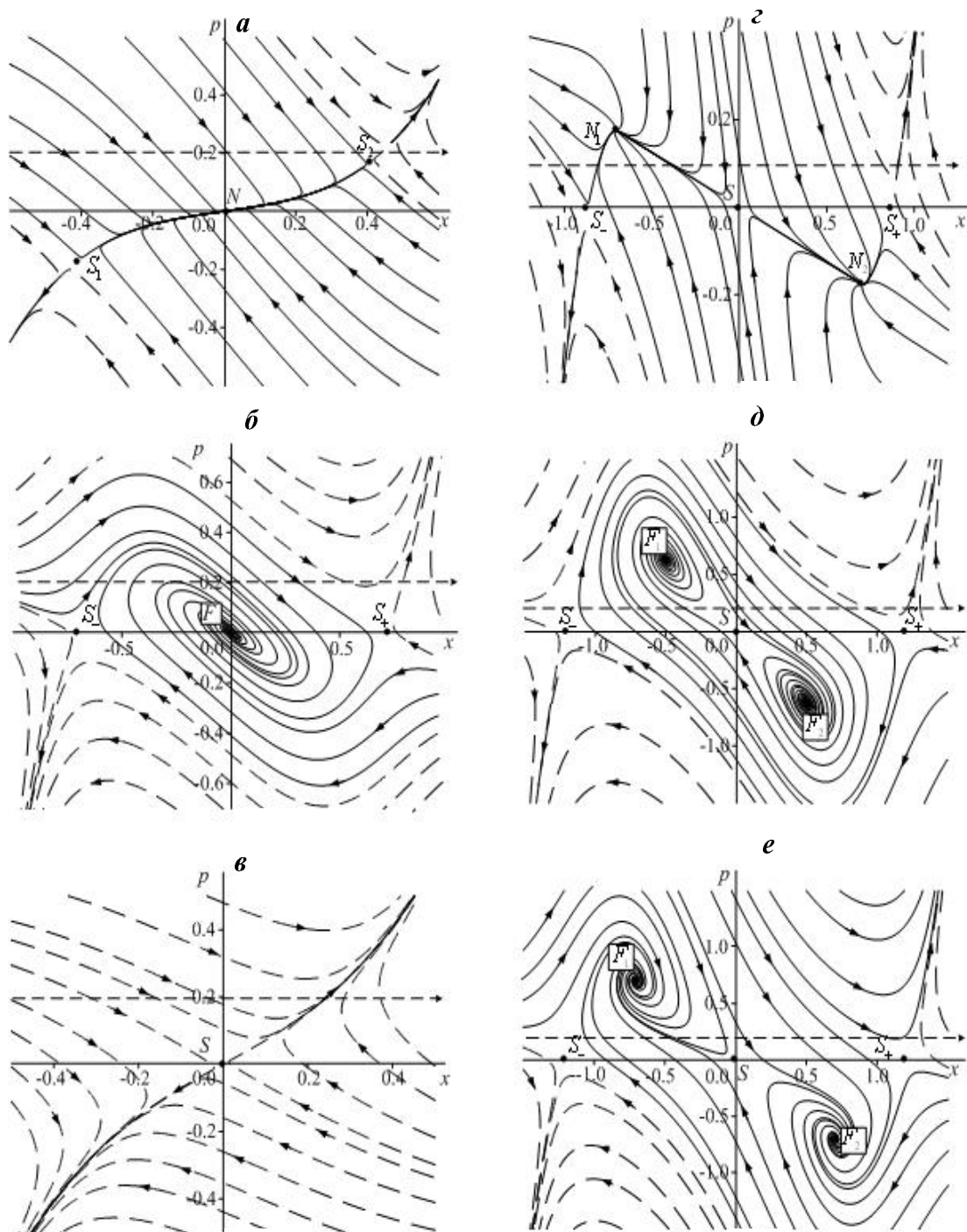


Рисунок 2.1 – Фазові портрети: ліворуч вище точки переходу ( $\varepsilon = 0.5$ ) при  $\xi = 2$  та  $\lambda = 1$  (а),  $\xi = 1$  та  $\lambda = 2$  (б),  $\xi = 10$  та  $\lambda = 10$  (в); праворуч нижче точки переходу ( $\varepsilon = -0.5$ ) при  $\xi = 2$  та  $\lambda = 1$  (г),  $\xi = 1$  та  $\lambda = 2$  (д),  $\xi = 1$  та  $\lambda = 1$  (е). Штриховими лініями вказані траєкторії, що реалізуються з малою імовірністю, пунктирні промені відповідають постійній амплітуді флуктуацій  $p = 0.2$

а статистична сума визначається умовою нормування:

$$Z_q = \int \exp_q[-S\{p(x)\}] \{\delta p\}, \{\delta p\} \equiv \prod_x \delta p(x). \quad (2.23)$$

Для подання функціональної залежності (2.22) в графічному вигляді далі проведемо перебір фазових траєкторій вздовж променів, показаних на рисунку 2.1 а – е при постійній амплітуді флуктуацій  $p = 0.2$ . В результаті отримуємо розподіли імовірностей реалізації цих траєкторій, що показані на рисунку 2.2. З них видно, що зазначені імовірності визначаються положеннями сепаратриси на фазових портретах (на рисунку 2.1 траєкторії, що відповідають кінцевим ймовірностям, виділені суцільними лініями).

Звертає на себе увагу той факт, що в однорідному неупорядкованому стані (рисунок 2.1 а) з кінцевою імовірністю реалізуються траєкторії, обмежені тільки великими значеннями параметра порядку. З іншого боку, гетерофазні флуктуації неупорядкованого стану (рисунок 2.1 б) і зміни параметра порядку в усіх режимах впорядкованого стану (рисунок 2.1 г – е) обмежені як згори, так і знизу. Порівняння рисунку 2.1 г з рисунком 2.1 д, е показує, що трансформація стійких вузлів до фокусів приводить до більш рельєфної зміни імовірності реалізації різних траєкторій. З іншого боку, з рисунка 2.3 видно, що при значному зростанні параметра неадитивності всі дозволені траєкторії стають практично рівно імовірними.

Розглянемо неадитивний статистичний ансамбль, що складається з частинок, розподілених за станами  $q = \{r_i, p_i\}$  у фазовому просторі з координатами  $r_i$  та імпульсами  $p_i$ , що визначаються гамільтоніаном  $H = H(q)$ . Для просторово-часової залежності параметра порядку  $x = x(r, t)$  статистичний функціонал:

$$\mathcal{Z}_q\{x\} = \int e_q^{-\beta H(q)} \delta[x - x(q)] dq, \quad (2.24)$$

залежить від зворотної температури  $\beta \equiv T^{-1}$ , та пов'язаний з ефективною дією  $S_q\{x\}$  рівнянням:

$$\mathcal{Z}_q\{x\} := e_q^{-S_q\{x\}}. \quad (2.25)$$

Згідно з деформованим перетворенням Фур'є генеруючий функціонал



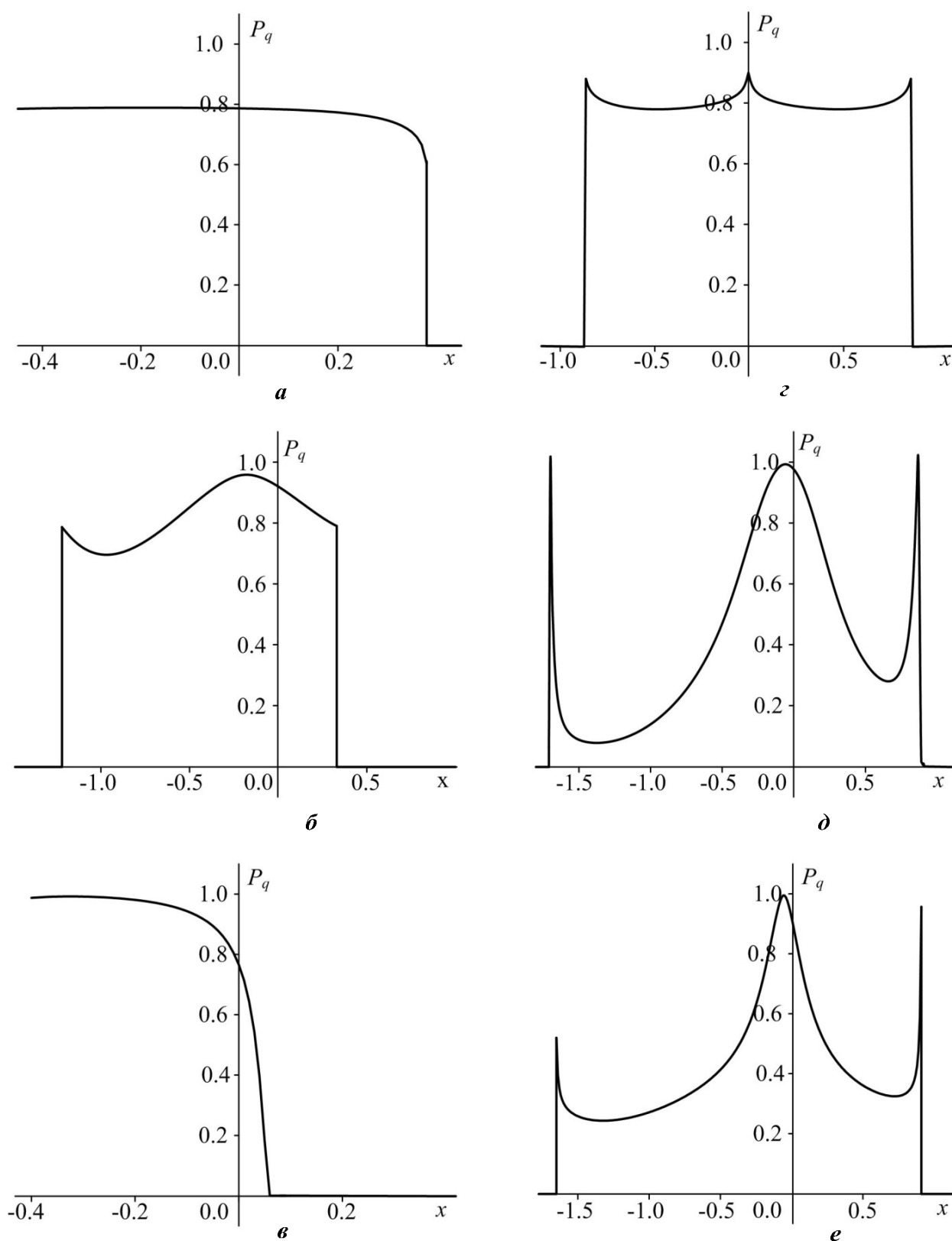


Рисунок 2.2 – Розподіл імовірностей реалізації різних траєкторій, що відповідають змінам параметра порядку  $x$  для постійної амплітуди флуктуацій  $p = 0.2$  при параметрі неадитивності  $q = 0.4$

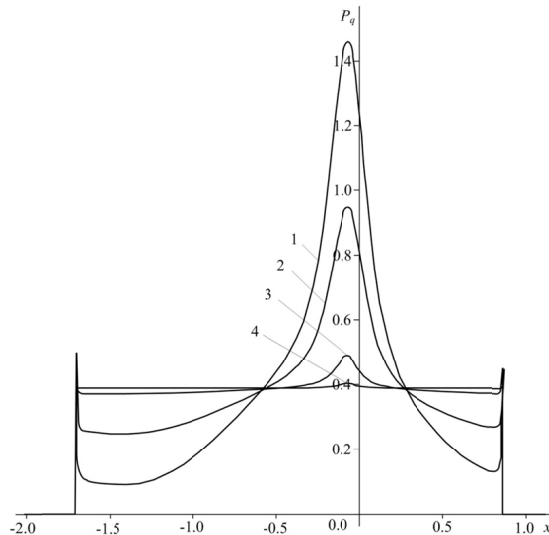


Рисунок 2.3 – Розподіл ймовірностей реалізації фазових траєкторій на рис.2.1 е при параметрах неадитивності  $q = 0.4, 1.0, 10, 100$  (криві 1–4 відповідно)

представляється узагальненим перетворенням Лапласа:

$$\mathcal{Z}_q\{u(r, t)\} := \int \mathcal{Z}_q\{x\} \otimes_q e_q^{u \cdot x} \{\delta x\} = \int e_q^{u \cdot x - S_q\{x\}} \{\delta x\}, \quad (2.26)$$

де позначено  $u \cdot x \equiv \int u x d r d t$ .

Оскільки експонента Цалліса  $e_q^x$  зберігає свою форму під дією оператора  $[1 + (1 - q)x]_+ d/dx$ , то далі зручно ввести  $q$ -варіаційну похідну  $\mathcal{D}_{x(r,t)}^q$ , дія якої на довільний функціонал  $f = f\{x(r, t)\}$  задається рівністю:

$$\mathcal{D}_{x(r,t)}^q f := [e_q^f]^{1-q} \frac{\delta f}{\delta x(r, t)}. \quad (2.27)$$

Тоді  $n$  – кратне варіювання генеруючого функціоналу (2.26) дає  $n$  – точковий корелятор:

$$\langle x(r_1, t_1) \mathcal{K} x(r_n, t_n) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_q\{u\}|_{u=0}} \left[ \mathcal{D}_{u(r_1, t_1)}^q \mathcal{K} \mathcal{D}_{u(r_n, t_n)}^q \right] \mathcal{Z}_q\{u(r, t)\}|_{u(r_1, t_1), \mathcal{K}, u(r_n, t_n)=0}, \quad (2.28)$$

який має ту саму структуру, що і в стандартній теорії поля. З урахуванням тотожності  $N$  частинок, що складають фізичну систему, її статистична сума

визначається виразами:

$$Z_{N_q} := \frac{1}{N!} \mathcal{Z}_q\{u = 0\} = \frac{1}{N!} \int e_q^{-S_q\{x\}} \{\delta x\}. \quad (2.29)$$

Як і в звичайній польовій схемі, незручність генеруючого функціоналу (2.26) полягає в його неадитивності [92]. Для усунення цього недоліку введемо функціонал:

$$\mathcal{G}_q\{u\} := \ln_q(\mathcal{Z}_q\{u\}), \quad (2.30)$$

що являє собою деформований логарифм виразу (2.26). Якщо у функціональній залежності (2.30) зручно перейти від допоміжного поля  $u(r, t)$  до параметра порядку  $x(r, t)$ , то слід провести перетворення Лежандра:

$$\Gamma_q\{x\} := u \cdot x - \mathcal{G}_q\{u\}, \quad (2.31)$$

яке приводить до  $\Gamma_q = \Gamma_q\{x\}$ . Пара функціоналів  $\mathcal{G}_q\{u\}$ ,  $\Gamma_q\{x\}$  відіграють роль спряжених потенціалів, варіація яких дає рівняння станів:

$$x(r, t) = \mathcal{D}_u^q \mathcal{G}_q\{u\} \Leftrightarrow u(r, t) = \mathcal{D}_x^q \Gamma_q\{x\}. \quad (2.32)$$

Перше з них являє узагальнення термодинамічного визначення параметра порядку, друге впливає з перетворення Лежандра (2.31) після його варіації за параметром порядку. Як аналітичні функціонали, потенціали  $\mathcal{G}_q\{u\}$ ,  $\Gamma_q\{u\}$  задаються такими рядами:

$$\mathcal{G}_q\{u\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{[n]_q!} \sum_{1, K, n} \mathcal{G}_{1, K, n}^{(n)} u_1 \mathbb{K} u_n, \quad (2.33)$$

$$\Gamma_q\{u\} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{[n]_q!} \sum_{1, K, n} \Gamma_{i, K, n}^{(n)} \eta_1 \mathbb{K} \eta_n, \quad \eta_i \equiv x_i - \mathcal{G}_i^{(1)}. \quad (2.34)$$

де  $[n]_q!$  – факторіали  $q$ -деформованих чисел

$$[n]_q = [1 + (1 - q)(n - 1)]_+^{-1} n = (e_q^n)^{-(1-q)} n,$$

індекси  $i = 1, K, n$  означають координати  $r_i$ ,  $t_i$  простору-часу, ядра  $\mathcal{G}_{1,K,n}^{(n)}$ ,  $\Gamma_{1,K,n}^{(n)}$  зводяться до  $n$  – часткових функцій Гріна.

Подібно до стандартної польової схеми генеруючий функціонал (2.26) задовольняє деякі формальні співвідношення. Перше з них відображає симетрію системи по відношенню до варіації  $\delta x_i = \epsilon f_i\{x\}$ , заданої аналітичним функціоналом  $f_i = f_i\{x\}$  на межі  $\epsilon \rightarrow 0$ . При варіюванні останній підінтегральний вираз у функціоналі (2.26) перетворюється наступним чином:

$$\begin{aligned}
e_q^{-S\{x+\delta x\}+u\{x+\delta x\}} &\simeq \\
&\simeq \left[ (1 + (1 - q)(-S\{x\} + u \cdot x)) + (1 - q) \left( -\frac{\partial S}{\partial x_i} + u_i \right) \delta x_i \right]_+^{1/(1-q)} = \\
&= e_q^{-S\{x\}+u \cdot x} \left[ 1 + \frac{(1 - q)(-\partial S/\partial x_i + u_i)}{1 + (1 - q)(-S\{x\} + u \cdot x)} \delta x_i \right]_+^{1(1-q)} \simeq \\
&\simeq e_q^{-S\{x\}+u \cdot x} \left[ 1 + \left( -\frac{\partial S}{\partial x_i} + u_i \right) \delta_q x_i \right]_+,
\end{aligned} \tag{2.35}$$

де мається на увазі підсумовування за повторюваними індексам і введений  $q$ -віріал (порівнянно з (2.27)):

$$\delta_q x_i := \left[ e_q^{-S\{x\}+u \cdot x} \right]^{q-1} \delta x_i. \tag{2.36}$$

З іншого боку, якобіан переходу від  $x$  до  $x + \delta_q x$  дає множник  $1 + (\partial f_i/\partial_q x_i)\epsilon$ , що визначається оператором  $q$ -диференціювання  $(\partial f/\partial_q x) = (e_q^f)^{1-q} (\partial f/\partial x)$  типу (2.27). Збираючи складові, пропорційні нескінченно малій величині  $\epsilon$ , з властивості інваріантності генеруючого функціоналу (2.26) отримаємо:

$$\left[ f_i \{ \mathcal{D}_u^q \} \left( \frac{\partial S}{\partial x_i} \{ \mathcal{D}_u^q \} - u_i \right) - \frac{\partial f_i}{\partial x_i} \{ \mathcal{D}_u^q \} \right] \mathcal{Z}_q \{ u \} = 0. \tag{2.37}$$

Тут використано перше рівняння станів (2.32) для операційного представлен-

ня:

$$f_i\{x\}e_q^{-S\{x\}+u \cdot x} = f_i\{\mathcal{D}_u^q\}e_q^{-S\{x\}+u \cdot x}.$$

При  $f_i\{x\} = \text{const}$  вираз (2.37) приймає спрощений вигляд, що впливає безпосередньо з генеруючого функціоналу (2.26) після його варіювання за полем  $x$ .

Друге зі згаданих співвідношень дозволяє врахувати наявність довільних зв'язків  $F_j\{x\} = 0$ ,  $j = 1, 2, \dots$ , для потрібного набору значень поля  $x = x(r, t)$ . Врахування цих зв'язків досягається підстановкою  $\delta$ -функціонала  $\delta_q\{F\}$  до підінтегрального виразу (2.26), що приводить до подовженого генеруючого функціоналу:

$$\mathcal{Z}_q^{(F)}\{u, v\} := \int e_q^{-S\{x\}+u \cdot x+v \cdot F}\{\delta x\}\{\delta v\}. \quad (2.38)$$

Його варіювання за допоміжним полем  $v = v(r, t)$  дає шуканий результат:

$$F_i\{\mathcal{D}_v^q\}\mathcal{Z}_q^{(F)}\{u, v\} = 0. \quad (2.39)$$

У порівнянні зі стандартною польовою схемою головна особливість виразів (2.37), (2.39) полягає у тому, що вони містять  $q$ -варіаційну похідну (2.27).

Розглянемо спочатку гармонічне наближення, в рамках якого ефективна дія  $S_q^{(0)}\{x\} = \int \mathcal{L}_q^{(0)}(x(t))dt$  визначається сумою:

$$\mathcal{L}_q^{(0)} = \sum_{i=1}^N \lambda_q^{(0)}(x_i), \quad \lambda_q^{(0)}(x) = \frac{x^2}{[2]_q \Delta^2}, \quad [2]_q \equiv \frac{2}{|2 - q|}. \quad (2.40)$$

Тут кожний доданок задається зворотною кривизною  $\Delta^2$  і параметром неадитивності  $q$  (порівн. з роботою [93]). З урахуванням правил  $q$ -обчислення генеруючий функціонал (2.26) представляється деформованим добутком:

$$\mathcal{Z}_q^{(0)}\{u\} = z_q^{(0)}(u_1) \otimes_q \dots \otimes_q z_q^{(0)}(u_N) \quad (2.41)$$

одночасткових складових:

$$z_q^{(0)}(u) = \int \exp_q \left[ \int \left( ux - \frac{x^2}{[2]_q \Delta^2} \right) dr dt \right] \delta x. \quad (2.42)$$

При знаходженні статистичної суми  $Z_{qN}^{(0)}$  слід врахувати тотожність частинок, число перестановок яких дорівнює  $q$ -факторіалу при  $n = N$ . В результаті приходимо до визначення:

$$Z_{qN}^{(0)} := \mathcal{Z}_q^{(0)} \circledast_q N!_q, \quad (2.43)$$

де  $q$ -деформований факторіал  $N!_q$  числа  $N \gg 1$  визначається формулою Стірлінга, якій зручно надати вигляду<sup>1</sup>:

$$N!_q \simeq \exp_q \left[ \frac{N}{|2-q|} \ln_q (N \div_q e_q) \right], \quad q \neq 2. \quad (2.44)$$

Тут  $e_q \equiv |2-q|^{1/(1-q)} - q$  -деформована основа натурального логарифма, що приймає звичайне значення  $e_1 \equiv e \simeq 2.718$  при  $q = 1$ . З (2.44) з використанням генеруючого функціоналу (2.41) знаходимо:

$$Z_{qN}^{(0)} = z_q^{(0)}(0) \otimes_q \dots \otimes_q z_q^{(0)}(0) \div_q \exp_q \left[ \frac{N}{|2-q|} \ln_q (N \div_q e_q) \right], \quad (2.45)$$

де позначено  $z_q^{(0)} \equiv z_q^{(0)}(u_i = 0)$ . Використовуючи  $q$ -логарифмування, можна привести рівність (2.45) до адитивної форми  $\ln_q (Z_{qN}^{(0)}) = N \ln_q (z_q^{(0)})$ , де одночасткова статистична сума визначається виразом:

$$z_q^{(0)} := \exp_q \left\{ \ln_q [z_q^{(0)}(0)] - \frac{1}{|2-q|} \ln_q (N \div_q e_q) \right\}, \quad (2.46)$$

в якому величина  $z_q^{(0)}(0)$  задається рівністю (2.42).

---

<sup>1</sup>Відмітимо, що при визначенні деформованого добутку не врахована умова позитивності виразу, що стоїть в квадратних дужках. Тому для великих чисел  $n \gg 1$   $q$ -логарифм  $\ln_q(n!_q)$  може приймати негативні значення при  $q > 2$ . Щоб уникнути цього слід брати різницю  $2 - q$  за абсолютним значенням.

# 1 МІКРОСКОПІЧНИЙ ПІДХІД В РАМКАХ МОДЕЛІ ІЗІНГА

## 3.1 Опис неадитивних властивостей

Існує багато різних магнітних моделей, у яких спіни, які закріплені у вузлах решітки, взаємодіють один з одним та зовнішнім полем. Наприклад, модель Гейзенберга розглядає взаємодію спінових операторів у повному розумінні квантової механіки. Х-У модель забороняє спінам мати проекції на одну із координатних осей. Сферична або гаусова модель додає гаусову імовірність для проекції класичних спінів. Модель Ізінга розглядає проекцію квантових спінів тільки на вісь магнітного поля. Усі вище зазначені моделі є ілюстрацією поведінки систем при фазових переходах. Однак найбільше розповсюдження отримала модель Ізінга. Ця модель зберігає квантову дискретність явищ, однак обходить складності матричного обчислення, розглядаючи проекції спінів лише на одну вісь. Тому вона є найбільш простою, й разом з тим, найбільш ілюстрованою моделлю магнітних систем [94, 97].

Модель Ізінга була розглянута Ленцом та вивчена його студентом Ізінгом. Початковим її призначенням було наближений опис явищ феромагнетизму. Пізніше модель отримала широку популярність із-за фазового переходу, який у ній відбувається. У наш час саме останнє є основною перевагою моделі. Тому вона подібно моделям ідеального газу, або газу Ван дер Ваальса, стала канонічною, у тому сенсі, що її властивості досліджуються без прив'язки їх до конкретних систем [97].

Для моделі, яка враховує взаємодію спінів, точний аналітичний розв'язок може бути отриманий у виключених випадках. У випадку довільної решітки для отримання рішення необхідне використовувати наближення ренормалізаційної групи. Також є інше наближення – наближення середнього поля, яке існувало до відкриття методу ренормалізації. Воно є менш точним, працює лише на визначеній дистанції від критичної точки. Однак це

наближення стало класичним завдяки своїй унікальній здатності, ілюструвати властивості фазових переходів. Для системи без взаємодії існує лише параметр дальнього порядку.

У цьому й полягає геніальність теорії Ландау, що вона за допомогою двох доданків розкладу ряду Тейлора наочно ілюструє теорію критичних явищ. Однак цим результати, які дає дана теорія, не вичерпуються. Окрім фазових переходів другого роду теорія Ландау також ілюструє фазові переходи першого роду (саме магнітні фазові переходи першого роду частіше за все спостерігаються в експериментах з ансамблем наночастинок) [97].

Статистична механіка Больцмана-Гіббса встановлює надзвичайно корисний міст між механічними мікроскопічними законами і класичною термодинамікою. Вона робить це шляхом просування конкретного з'єднання його дискретної версії ентропії з мікроскопічними станами системи. Однак ця теорія не є універсальною. Багато фізичних явищ, у тому числі й поведінка нанокластерів при магнітних переходах не можуть бути розглянуті цією спрощеною гіпотезою. Тому, на мікроскопічному рівні динамічний, сильний хаос, як правило, замінюється його слабкою версією, коли чутливість до початкових умов зростає не експоненціально, а скоріше степеневі. Багато теоретичних, експериментальних ознак в даний час вказують на можливість опису магнітних переходів у ансамблях наночастинок на основі неадитивної статистичної механіки [97].

### 3.2 Ентропія неадитивних систем

Ще у 1865 році Р. Клаузіусом була введена концепція (і сам термін) ентропії в контексті класичної термодинаміки та без урахування мікроскопічної взаємодії. Однією з властивостей, що природно виникли в рамках концепції Клаузіуса, є адитивність ентропії, яка в мікроскопічному розумінні пов'язана



з числом елементів системи. Л. Больцман, а потім і Д. Гіббс запропонували співвідношення  $S_{BG} = -k \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i$ , яке пов'язує ентропію Клаузіуса з мікростанами системи ( $W$  – число відповідних мікростанів,  $p_i$  – імовірність їх реалізації,  $k$  – стала Больцмана). Однак, виявилось, що теорія Больцмана-Гіббса не є універсальною і має обмежену сферу застосування [93, 97].

З одного боку дана теорія застосована на припущенні, що всі елементи системи незалежні, в результаті чого і реалізується властивість адитивності ентропії. Крім того, була використана гіпотеза молекулярного хаосу, в рамках якої частинки системи до зіткнення ніяк не корелюють одна з одною. Звичайно для більшості макроскопічних фізичних систем сили взаємодії між частинками є короткодійними і поширюються тільки на обмежене число найближчих сусідів, але як бути з тими складними системами, в яких виявлена далекодійна взаємодія? Окрім цього, необхідно врахувати той факт, що на мікроскопічному рівні зазвичай реалізується більш слабкий хаос і чутливість до зовнішніх умов зростає не експоненціально, а згідно з степеневим законом.

З іншого боку дана теорія описує специфічний стаціонарний стан, що називається термодинамічною рівновагою, а, як відомо, останнім часом все більше уваги привертають складні фізичні, біологічні, соціальні та інші системи, для яких основними є не рівноважні стаціонарні стани [97].

В результаті виникає природне запитання: а чи можливо створити більш загальну теорію, яка в окремому випадку приводить до теорії Больцмана-Гіббса за умови термодинамічної рівноваги і незалежності елементів системи. Однозначної відповіді на це питання поки що не існує, але у 1988 р. бразильським вченим Константіно Цаллісом була зроблена спроба розширити сферу застосування статистичної механіки і термодинаміки, в результаті чого виник новий напрям – неадитивна статистична механіка та термодинаміка. Основою даного напрямку є узагальнений вираз для ентро-

пії [94, 97].

$$S_q = -k \sum_{i=1}^W p_i^q \ln_q p_i = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1},$$

що в межі  $q \rightarrow 1$  приводить до звичайної ентропії Больцмана ( $q$  – параметр деформації).

На сьогодні сфери застосування неадитивної статистичної механіки досить широкі, про що свідчить безліч прикладів із різних галузей науки. При цьому кожен випадок заслуговує окремого аналізу, оскільки деякі з них доведені експериментально і / або теоретично, інші феноменологічними спостереженнями, коли параметр деформації  $q$  отримується прямою підстановкою (здебільшого через невизначеність, що має місце в мікроскопічному світі). Нарешті, опис деяких випадків може бути представлений тільки як імовірнісний через нестачу даних. Крім того, необхідно врахувати, що для одних прикладів  $q$  задає степінь розподілу, для інших – чутливість до зовнішніх умов, мультифрактальність і т.д.

В астрофізиці та космології зв'язок з  $q$  - деформованою теорією встановлений для самогравітуючих систем [98], для розподілу швидкостей спіральних галактик, проблеми сонячного нейтрино [99, 100], космічного фонового мікрохвильового випромінювання [98], енергії розподілу космічних променів [99]. У фізиці твердого тіла подібний зв'язок виявляється при вивченні високих температур надпровідності [100], бозе-ейнштейнівської конденсації і сильного зв'язку електронів; в нелінійній динаміці особлива увага приділяється застосуванню теорії Цалліса до тривимірної турбулентності [101]. Крім того, в рамках зазначеної теорії закон Арреніуса виконується й для аномальної дифузії [101]. Явище самоорганізованої критичності (зокрема, для моделі біологічної еволюції), представляється близьким до концепцій, що виникли в рамках існуючого неадитивного формалізму.

Слід зазначити ще один приклад застосування статистичної теорії неадитивних систем – опис об'єктів кінцевого розміру, важливість дослід-

ження яких зростає з розвитком нанотехнологій. Наприклад, для задачі про розділення макросистеми на декілька частин було виявлено, що точність (з урахуванням різниці поверхневих енергій цілої та розділених частин системи), з якою зберігається адитивність, приблизно дорівнює розміру атома, поділеному на розмір системи. Таким чином, чим менше є розмір системи, тим більшими будуть ефекти неадитивності. Дійсно, для кінцевої кількості частинок  $N$  параметр деформації набуває значення, які представлені у параграфі 3.1 формулою (2.1). На відміну від звичайного статистичного ансамблю неадитивна система підпорядковується статистиці Цалліса. Формалізм неадитивної статистичної системи розглянутий у доданку до дисертації.

### 3.3 Гамільтоніан Ізінга з урахуванням властивості неадитивності

Модель Ізінга є основою мікроскопічної теорії фазових переходів [102]. На відміну від моделі Гейзенберга, де для кожного вузла регулярної решітки спін може набувати будь-яке значення (дивись рисунок 3.1, вона має тільки два значення спіна  $S_i = \pm 1$ ).

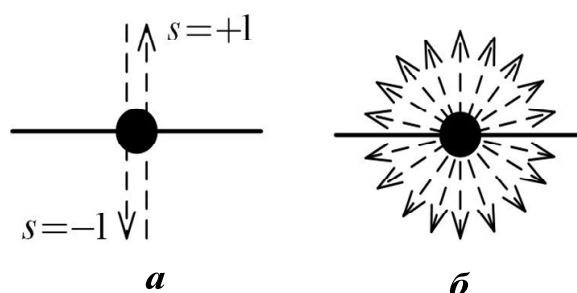


Рисунок 3.1 – Схематичне зображення можливих напрямків спінів вузлів регулярної решітки для а) моделі Ізінга, б) моделі Гейзенберга

Не дивлячись на це, точного аналітичного опису фазового переходу парамагнетик-феромагнетик (РМ–ФМ) в рамках моделі Ізінга для тривимірного випадку досі не існує. Проте дана модель дозволяє якісно представити

ти основні властивості фазового переходу РМ–ФМ у рамках наближення середнього поля. Але для опису об’єктів кінцевого розміру, як вже зазначалося, статистика Гіббса-Больцмана не підходить, тому необхідно звернутися до більш загального підходу Цалліса. Виникає питання, як вплине подібна «деформація» на картину фазового переходу? З формальної точки зору узагальнення статистики Гіббса-Больцмана відбувається завдяки заміні вихідної імовірності  $p_i$  на деформовану  $p_i^q$ . Спробуємо поширити дану процедуру на мікроскопічному рівні, тобто використаємо деформований гамільтоніан Ізінга внаслідок зміни спіна  $i$ -го вузла  $s_i$  на деформований варіант  $s_i^q$ .

У відповідності з поставленою задачею гамільтоніан набуває вигляду:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j}^N J_{ij} s_i^q s_j^q - h \sum_i s_i^q. \quad (3.1)$$

Тут сума береться за всіма вузлами  $N$  решітки з індексами  $i \neq j$ ;  $J_{ij}$  – потенціал ефективної взаємодії;  $h$  – зовнішнє поле;  $s_i = \pm 1$  – значення деформації у кожному вузлі;  $q$  – параметр неадитивності (деформації); коефіцієнт  $\frac{1}{2}$  враховує подвійний перебір індексів  $i \neq j$ .

В рамках наближення середнього поля врахуємо, що

- множник  $s_i^q$  замінюється середнім значенням  $\langle s_i^q \rangle$ ;
- основний внесок до гамільтоніана надає тільки взаємодія найближчих сусідів, число яких дорівнює  $z$ ;
- потенціал ефективної взаємодії зводиться до позитивної константи  $J > 0$ , знак якої визначає тип матеріалу (ФМ).

В результаті ефективний гамільтоніан має вигляд:

$$H_{ef} = \sum_i \varepsilon_i, \quad (3.2)$$

де:

$$\varepsilon_i = -h_q s_i^q; \quad h_q = h + T_c \langle s^q \rangle. \quad (3.3)$$

В останньому виразі введена критична температура  $T_c = zJ$ , при цьому  $\varepsilon_i$  може бути розглянута, як енергія  $i$ -того вузла.

Оскільки модель Ізінга має дискретну симетрію, інваріантну до перетворення спіна  $s_i \rightarrow -s_i$  та зовнішнього поля  $h \rightarrow -h$ , то наша теорія має сенс при виконанні умови  $(-1)^q = -1$ . Тоді, використовуючи комплексне подання для  $-1$ , можна отримати додаткову умову на можливі значення  $q$ :

$$q = \frac{2m + 1}{2n + 1}, \quad (3.4)$$

де  $m, n$  - цілі числа ( $m, n = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$ ).

Таблиця 3.1 — Деякі можливі значення параметра  $q$  у вигляді звичайного та десятинного дробу для різних значень  $m$  та  $n$

m	n	q	q
0	5	1/11	0.091
0	2	1/5	0.2
1	2	3/5	0.6
3	4	7/9	0.778
1	1	1	1
10	9	21/19	1.105
3	2	7/5	1.4
4	2	9/5	1.8
5	2	11/5	2.2
6	2	13/5	2.6

Для подальшого розгляду необхідно визначити середнє  $\langle s^q \rangle$  з дробовим показником  $q$ . У роботі [103] було розглянуто аналогічну задачу. Наприклад, якщо для змінної  $s$  існує початковий розподіл  $P_q(x)$  для стохастичної змінної, то  $x = s^q$ . Крім того, можна припустити, що ці два розподіли зв'язані між собою співвідношенням  $s^q P(s) ds = x P_q(x) dx$ . Якщо середнє за розподі-

лом  $P_q(x)$  позначити  $\langle \dots \rangle_q$  та використати звичайні кутові дужки  $\langle \dots \rangle$  для позначення середнього за початковим розподілом  $P(s)$ , то можна отримати співвідношення  $\langle s^q \rangle = \langle x \rangle_q$ . При цьому у [103] доведено, що така задача має сенс тільки у випадку самоподібних систем, де функція розподілу має степеневий вигляд, тобто  $P(s) = N_p^{-1} s^{-\mu}$ , де  $\mu$  – показник степені,  $N_p$  – константа нормування:

$$N_p = \frac{1}{|1 - \mu|} \alpha^{\mu-1}, \quad \alpha \rightarrow 0. \quad (3.5)$$

Звернемося до визначення показника  $\mu$ . Із [103] відомо, що при  $1 < \mu < 2$ , коли фрактальна розмірність фазового простору  $D = 2 - \mu$  буде менше за 1, система завжди буде неупорядкованою; у випадку, коли  $0 < \mu < 1$  фрактальна розмірність  $D > 1$  і система може бути впорядкованою. Тому подальший розгляд всіх можливих залежностей рівноважного значення параметра порядку ми будемо розглядати лише в області  $\mu \in (0, 1)$ .

У результаті дробове середнє можна представити у вигляді:

$$\langle s^q \rangle = \beta^{-1} (N_p(2 - \mu))^{\beta-1} \langle s \rangle^\beta, \quad (3.6)$$

де введено позначення:

$$\beta \equiv \frac{q + 1 - \mu}{2 - \mu}. \quad (3.7)$$

Оскільки у початковій мікроскопічній теорії, побудованій на основі моделі Ізінга, параметр порядку, що відрізняє неупорядкований стан (РМ) від впорядкованого (FM), являв собою середній спін  $\langle s_i \rangle = \langle s \rangle = \eta$ , то й у випадку неадитивних систем логічно буде скористатися цим співвідношенням. В результаті отримаємо ефективний гамільтоніан неадитивної системи у вигляді:

$$H_{ef} = - \sum_i (h + CT_c \eta^\beta) s_i, \quad (3.8)$$

де параметр:

$$C \equiv \beta^{-1} (N_p(2 - \mu))^{\beta-1}. \quad (3.9)$$

Оскільки гамільтоніан (3.8) від'ємний, то початок відліку можна обрати нульовим, в протилежному випадку система при впорядкуванні буде мати нескінченно велику від'ємну енергію. Щоб уникнути цього слід врахувати самодію, що відображає принцип Ле-Шательє. Вперше це зробив академік АН УРСР М.М. Боголюбов у 50-х роках минулого століття при поясненні на мікроскопічному рівні явища надтекучості. В його теорії складова гамільтоніана, що відображає самодію, задається квадратичним доданком:

$$H_0 = \frac{N}{2} T_c \eta^2. \quad (3.10)$$

В кінцевому вигляді ефективний гамільтоніан системи подається наступним чином:

$$H_{ef} = \frac{N}{2} T_c \eta^2 - h \sum_i s_i - C T_c \eta^\beta \sum_i s_i. \quad (3.11)$$

### 3.4 Отримання феноменологічної моделі з мікроскопічної

Відомо, що феноменологічна теорія фазових переходів Ландау дає співвідношення для рівноважного параметра порядку  $\eta \equiv \langle s \rangle$ . Для задач подібного типу середнє визначають згідно з розподілом Гіббса:

$$P\{s_i\} = Z^{-1} \exp\left(-\frac{H_{ef}}{T}\right), \quad (3.12)$$

де  $Z$  – статистична сума;  $H_{ef}$  – гамільтоніан (3.11);  $T$  – температура в енергетичних одиницях.

Спочатку знайдемо статистичну суму за всіма наборами можливих орієнтацій спінів для всіх вузлів:

$$Z = Z_0 \sum_{\{s_i\}} \exp\left(\alpha \sum_i s_i\right). \quad (3.13)$$

Тут:

$$Z_0 = \exp\left(-\frac{N T_c}{2 T} \eta^2\right), \quad (3.14)$$

$$\alpha \equiv \frac{h}{T} + C \frac{T_c}{T} \eta^\beta. \quad (3.15)$$

Оскільки під експонентою у формулі (3.13) стоїть сума за всіма вузлами, то дану експоненту можна представити у вигляді добутку вузельних експонент, який, в свою чергу, можна поміняти місцями із сумою за всіма наборами спінів. В результаті отримаємо вираз:

$$Z = Z_0 \prod_{i=1}^N \sum_{s_i} \exp(\alpha s_i), \quad (3.16)$$

де залишаються тільки ті доданки, котрі відносяться до даного вузла  $i$ , тобто  $\{s_i\} \rightarrow s_i$ . Оскільки  $s_i = \pm 1$ , то остання сума у (3.16) легко обчислюється:

$$Z = Z_0 (2 \operatorname{ch} \alpha)^N. \quad (3.17)$$

Підставляючи до (3.17) співвідношення (3.14), (3.15), маємо:

$$Z = \exp\left(-\frac{N T_c}{2 T} \eta^2\right) \left[2 \operatorname{ch}\left(\frac{h}{T} + C \frac{T_c}{T} \eta^\beta\right)\right]^N. \quad (3.18)$$

З термодинаміки відомо, що вільна енергія пов'язана зі статистичною сумою співвідношенням:

$$F = -T \ln Z. \quad (3.19)$$

Підставляючи статистичну суму неадитивної системи (3.18) до (3.19), отримуємо остаточний вираз для вільної енергії неадитивної системи:

$$F = \frac{N}{2} T_c \eta^2 - T N \ln 2 - T N \ln \operatorname{ch}\left(\frac{h}{T} + C \frac{T_c}{T} \eta^\beta\right) \quad (3.20)$$

Тут перший доданок відповідає енергії самодії, другий доданок не залежить від параметра порядку, але відіграє важливу роль, оскільки визначає зменшення енергії внаслідок зростання безладу. Основну роль у рівнянні (3.20)



відіграє останній доданок, який не зводиться до стандартної форми (наприклад, до форми Ландау). Але цього і не повинно бути, оскільки енергія (3.20) отримана із мікроскопічної теорії та вірна за будь-якої температури  $T$ , а феноменологічна теорія Ландау, по-перше, вірна поблизу критичної температури  $T_c$ , по-друге, не враховує властивість неадитивності.

Для отримання феноменологічної теорії слід провести розклад косинуса гіперболічного та логарифму в рівнянні (3.20). В результаті отримаємо формулу для вільної енергії у загальній формі:

$$F = \frac{N}{2} T_c \eta^2 - TN \ln 2 - \frac{TN}{2} \left[ \left( \frac{h}{T} + C \frac{T_c}{T} \eta^\beta \right)^2 - \frac{1}{6} \left( \frac{h}{T} + C \frac{T_c}{T} \eta^\beta \right)^4 \right]. \quad (3.21)$$

Далі введемо позначення густини вільної енергії, яка припадає на один вузол:

$$f = \frac{F}{N}. \quad (3.22)$$

У наближенні  $h = 0$  рівняння (3.21) можна переписати у вигляді:

$$f = -T \ln 2 + \frac{T_c}{2} \eta^2 - \frac{C^2 T_c^2}{2T} \eta^{2\beta} + \frac{C^4 T_c^4}{12T^3} \eta^{4\beta}. \quad (3.23)$$

Перший доданок у (3.23) виник у зв'язку зі зменшенням вільної енергії внаслідок переходу із неупорядкованого стану до упорядкованого та не залежить від параметра порядку, при цьому під змінною вільної енергії мається на увазі тільки різниця в початках відліку упорядкованої та неупорядкованої фаз. Цей доданок не характерний для феноменологічної теорії, оскільки містить надлишкову інформацію, котру неможливо отримати наближеними методами. Таким чином виразом  $-T \ln 2$  для феноменологічного випадку можна знехтувати. В результаті отримаємо:

$$f = \frac{T_c}{2} \eta^2 - \frac{C^2 T_c^2}{2T} \eta^{2\beta} + \frac{C^4 T_c^4}{12T^3} \eta^{4\beta}. \quad (3.24)$$

Враховуючи, що для  $q \rightarrow 1$  всі співвідношення, використані в рамках

неадитивної механіки, набувають «класичного» вигляду, розглянемо, який вигляд у цьому випадку матиме густина енергії (3.24):

$$f_{q \rightarrow 1} = \frac{T - T_c}{2} \eta^2 + \frac{1}{4} \frac{T_c}{3} \eta^4. \quad (3.25)$$

Тут враховано, що згідно (3.9) коефіцієнт  $C \equiv 1$  при  $q \rightarrow 1$ .

Порівнюючи рівняння (3.25) з розкладом Ландау:

$$f_L = \frac{A}{2} \eta^2 + \frac{B}{4} \eta^4$$

можна записати, що в нашому випадку  $B = T_c/3$ ,  $A = \alpha(T - T_c)$ , де  $\alpha \equiv 1$ .

Не враховуючи доданок пропорційний  $\ln 2$ , розглянемо густина вільної енергії, отриману із (3.21), на границі  $q \rightarrow 1$ :

$$f_{q \rightarrow 1} = \frac{T - T_c}{2} \eta^2 + \frac{1}{4} \frac{T_c}{3} \eta^4 - \eta h + O(h, \eta). \quad (3.26)$$

Оскільки добавка  $O(h, \eta)$  містить добутки  $h$  та  $\eta$  зі степенями, вищими за першу, то в наближенні слабких полів цими доданками можна знехтувати. В результаті рівняння (3.26) зводиться до стандартної форми Ландау для вільної енергії з урахуванням зовнішнього поля:

$$f_L = \frac{A}{2} \eta^2 + \frac{B}{4} \eta^4 - \eta h. \quad (3.27)$$

Таким чином співвідношення (3.25) та (3.27) на границі  $q \rightarrow 1$  приводять до стандартної феноменологічної теорії Ландау.

### 3.5 Рівноважне значення параметра порядку

Згідно з умовою рівноваги  $\frac{\partial f}{\partial \eta} = 0$  для випадку нульового зовнішнього поля із (2.32) ожержимо співвідношення:

$$\eta \frac{T_c}{T} \left[ T - \beta C^2 T_c \eta^{2(\beta-1)} + \frac{\beta C^4 T_c^3}{3T^2} \eta^{2(2\beta-1)} \right] = 0. \quad (3.28)$$

Очевидно, що перше стаціонарне рішення  $\eta_0 = 0$  відповідає неупорядкованому стану. Дорівнюючи нулю квадратну дужку, після поділу на критичну температуру  $T_c$  отримаємо неявний вигляд стаціонарного рішення, що відповідає впорядкованому стану:

$$\frac{T}{T_c} - \beta C^2 \eta_0^{2(\beta-1)} + \frac{\beta C^4 T_c^2}{3T^2} \eta_0^{2(2\beta-1)} = 0. \quad (3.29)$$

За аналогією з теорією Ландау розглянемо нашу систему поблизу критичної температури, тобто для випадку  $|T - T_c| = T_c$ . Крім того, введемо безрозмірну температуру:

$$\theta = \frac{T}{T_c}. \quad (3.30)$$

В результаті можна одержати залежність  $\theta(\eta_0)$ :

$$\theta = \beta C^2 \eta_0^{2(\beta-1)} \left( 1 - \frac{C^2}{3} \eta_0^{2\beta} \right). \quad (3.31)$$

Враховуючи, що для температури у якості масштабу вимірювання ми обрали критичну температуру  $T_c$ , природно буде далі обрати масштаби і для інших змінних. Для параметра порядку можна скористатися загальновідомим співвідношенням теорії Ландау  $\eta_{oL} = (-\varepsilon)^{1/2}$ , що відображає залежність рівноважного значення параметра порядку від відносної температури  $\varepsilon \equiv \frac{T - T_c}{T_c}$ .

Порівнюючи  $\eta_{oL}$  з  $\eta_0$  із (3.31) для випадку  $q \rightarrow 1$ , отримаємо масштаб вимірювання параметра порядку  $\eta_s \equiv \sqrt{3}$ . Для густини вільної енергії оби-

раємо масштаб  $f_s \equiv \eta_s^2 T_c$ , а для поля  $h_s \equiv T_c$  відповідно.

В результаті у безрозмірному вигляді рівняння (3.24) і (3.31) набувають вигляду:

$$f = \frac{\theta}{2}\eta^2 - \frac{3^{\beta-1}C^2}{2}\eta^{2\beta} + \frac{3^{2(\beta-1)}C^4}{4}\eta^{4\beta}, \quad (3.32)$$

$$\theta = \beta C^2 \eta_0^{2(\beta-1)} \left( 1 - \frac{C^2}{3} \eta_0^{2\beta} \right). \quad (3.33)$$

Відповідні залежності зображені на рисунках 3.2 та 3.3.

Як видно з рисунком 3.2, чим більше параметр неадитивності відрізняється від критичного значення  $q = 1$ , тим для менших значень параметра порядку реалізується впорядкований стан.

Окрім цього, як свідчать крива 1 (дивись вкладку на рисунку 3.2 а) та криві 6 – 9 (дивись вкладку на рисунку 3.2 с), навіть для температур, менших за критичну, можлива реалізація впорядкованого стану.

На рисунку 3.2 наведена залежність безрозмірної вільної енергії (3.32) від параметра порядку  $\eta$  для  $\alpha = 0.001$ ,  $\mu = 0.5$ .

На рисунку 3.3 зображена температурна залежність рівноважного значення параметра порядку для різних значень параметра  $q$ . При цьому для  $q < 1$  змінюється характер залежності (порівнюючи криві 1–3 з кривою 4 на рисунку 3.3). Слід зазначити також, що для кривих 2–3 максимально можливе значення параметра порядку реалізується при температурі порядку  $(0, 1 - 0, 2)T_c$ . Цей результат можна пояснити тим, що залежність (3.24) була отримана за умови наближення  $|T - T_c| = T_c$ . Аналізуючи криві 5–7 на рисунку 3.3, можна зробити висновок, що рівноважне значення параметра порядку зазнає стрибка, тобто фазовий перехід для неадитивних систем може реалізуватися за механізмом фазового переходу першого роду (останнє може бути перевірено лише експериментально), або значення параметра  $q > 1$  для такого випадку не реалізуються.

У ізольованих нанокластерах і наносистемах спостерігаються магнітні фазові переходи, які зазвичай мають характер фазових переходів другого

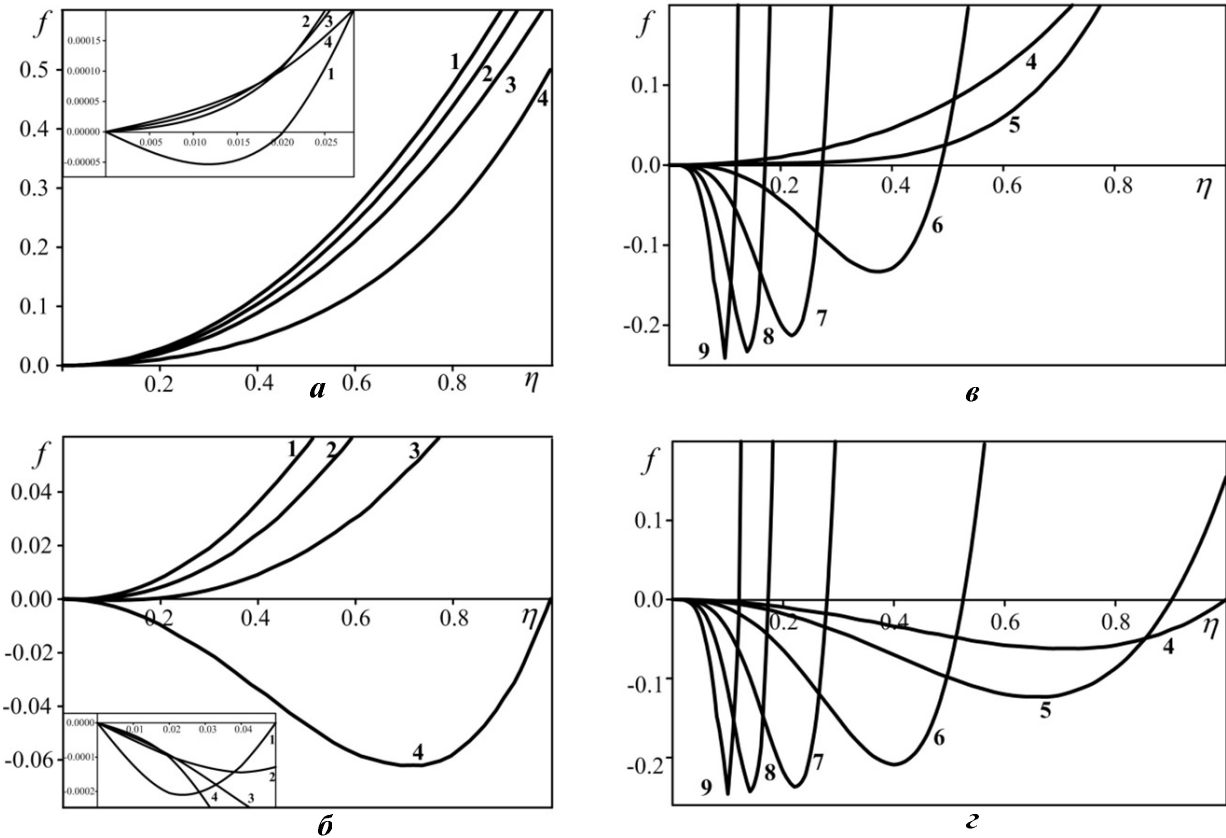


Рисунок 3.2 – Залежність безрозмірної вільної енергії (3.32) від параметра порядку  $\eta$  для  $\alpha = 0.001, \mu = 0.5$ . Поля (а), (в) відповідають  $\theta = 0.5$ , поля (б), (г)  $\theta = 1.5$ ; для кривої 1 –  $q = 1/5$ , кривої 2 –  $q = 3/5$ , 3 –  $q = 7/9$ , 4 –  $q = 1$ , 5 –  $q = 21/19$ , 6 –  $q = 7/5$ , 7 –  $q = 9/5$ , 8 –  $q = 11/5$ , 9 –  $q = 13/5$

роду<sup>2</sup>. Магнітні фазові переходи характеризуються ланжевенівськими залежностями намагніченості [104], зникненням магнітного порядку й спонтанної намагніченості при температурах Кюрі ( $T_c$ ) і Неєля ( $T_N$ ) відповідно, і плавними кривими змінами намагніченості з температурою.

Для ряду кластерів оксидів металів крім магнітних фазових переходів другого роду спостерігалися магнітні фазові переходи першого роду, коли наносистема втрачала спонтанну намагніченість стрибком при деякій температурі  $T_c$  або при деякому критичному розмірі кластера, менше якого кластер переходив у парамагнітний стан [104]. Магнітні фазові переходи першого роду в кластерах важко спостерігати за допомогою вимірювань намагніченості через розкид кластерів за розмірами (цей розкид неминуче веде до плавних змін

<sup>2</sup>Ці переходи подібні тим, які спостерігаються у масивних магнетиках.

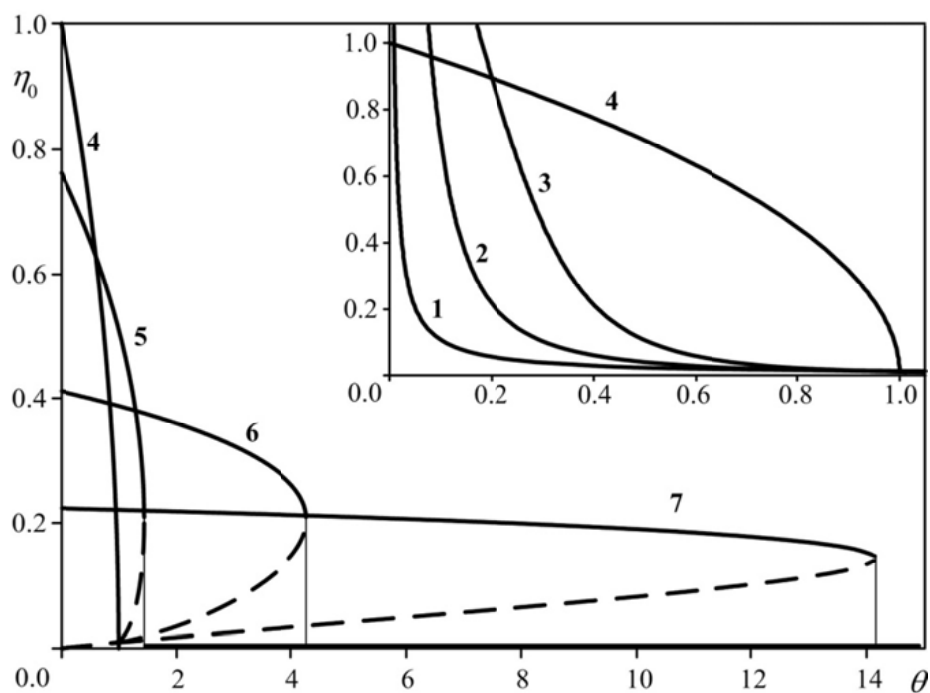


Рисунок 3.3 – Залежність рівноважного значення параметра порядку  $\eta_0$  від безрозмірної температури  $\theta$  для  $\alpha = 0.001, \mu = 0.5$ . Крива 1 відповідає  $q = 1/5$ , 2 –  $q = 3/5$ , 3 –  $q = 7/9$ , 4 –  $q = 1$ , 5 –  $q = 21/19$ , 6 –  $q = 7/5$ , 7 –  $q = 9/5$

намагніченості у наносистемі, і його важко відрізнити від суперпарамагнітної поведінки). Однак за допомогою месбауеровської спектроскопії можна розділити парамагнітний і магнітовпорядкований стани, тому вона широко використовується при вивченні магнітних фазових переходів.

Стрибкоподібні магнітні фазові переходи спостерігалися у нанокластерах і наносистемах на основі оксидів заліза [105, 106]. Відзначимо, що магнітні фазові переходи першого роду відбуваються також у деяких масивних оксидах і сплавах перехідних і рідкоземельних металів [104]. Для їх інтерпретації використовують термодинамічну модель [104]. Магнітні переходи першого і другого роду спостерігали, наприклад, для кластерів феррігідрита  $\text{Fe}_5\text{HO}_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , що утворилися в порах полісбора [97, 107].

Матричний метод дозволяє отримувати дві системи кластерів: систему з ізольованими одна від одної кластерами і з взаємодіючими один з одним кластерами (при знаходженні в порі декількох кластерів). Результати дозволяють припустити, що в кластерах феррігідрита відбувається стрибкоподіб-

ний магнітний фазовий перехід першого роду в області температур 3.2–6 К.

Ефекти, подібні магнітному фазовому переходу першого роду, спостерігалися також в нанокластерах  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ , в системі  $\alpha\text{-FeOOH-}\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ , а також у білках - ферритині і гемосидерині, що включають магнітне ядро  $(\text{FeOOH})_8 \cdot (\text{FeOOPo}_3\text{H})$  [104].

Магнітні фазові переходи першого роду, стимульовані межкластерними напруженнями і дефектами, виникають і в наносистемах, що містять нанокластери розміром 20–50 нм. Такі системи утворюються в твердотільних хімічних реакціях [104], наприклад при спіканні кластерів, і характеризуються значними міжкластерними взаємодіями. Переходи, які в них спостерігаються, подібні переходам в кластерах феррігідрита (1-3нм) в полімерній матриці. Мессбауеровські спектри наносистем  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-}\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  свідчать про наявність в цій системі стрибкоподібних магнітних переходів з магнітовпорядкованого стану в парамагнітний. Ці магнітні переходи відбуваються при розподілених критичних температурах  $T_{c0} = 120 - 300\text{K}$ , знижених в порівнянні з температурами  $T_{c0}$  для масивних зразків  $\alpha$ - та  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  (856 та 965 К відповідно).

## ВИСНОВКИ

У роботі було досліджено поведінку наночастинок на основі синергетичної системи рівнянь, побудована модель переходів між направленим, обертальним та переривчастим режимами руху наночастинок. Показано, що за умови врахування флуктуацій внутрішньої енергії можна описати перехід до переривчастого режиму руху. Побудовані діаграми можливих режимів поведінки ансамблю наночастинок за різних значень параметра внутрішнього стану.

Побудована польова модель, основна ідея якої полягає у поданні взаємодії між наночастинками, що здійснюється через флуктуаційне електромагнітне поле. При цьому статистична модель описує поведінку ансамблю наночастинок на основі рівнянь для термодинамічних потенціалів, які не мають властивості адитивності. В результаті одержано ефективний лагранжіан системи, виходячи з якого визначені рівняння еволюції найбільш імовірних значень параметра порядку, що характеризує стан ансамблю наночастинок. Вперше у ході аналізу польової схеми для опису неадитивної системи наночастинок показано, що деформація статистичного розподілу не змінює рівняння еволюції найбільш імовірних значень концентрації наночастинок та амплітуди її флуктуацій, тоді як ймовірність реалізації різних фазових траєкторій істотно залежить від параметра неадитивності.

Також вплив властивостей неадитивності було досліджено на прикладі магнітних фазових переходів у нанокластерних системах. В рамках теорії середнього поля було досліджено фазовий перехід парамагнетик-ферромагнетик для деформованої статсуми. Деформований гамільтоніан Ізінга для опису поведінки неадитивних систем був представлений шляхом заміни спінової змінної на деформовану. Досліджена температурна залежність рівноважного значення параметра порядку для різних значень параметра  $\lambda$ . При цьому для змінюється характер залежності, а рівноважне значення параметра порядку



набуває стрибок, тобто було доведено, що фазовий перехід для неадитивних систем може реалізовуватися за механізмом фазового переходу першого роду.

## ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Бадалян, А.Ю. Формування та режими руху ансамблів наночастинок в рамках статистичної теорії: дисертація ... канд. фіз.-мат. наук, спец.: 01.04.07– фізика твердого тіла / Бадалян А. Ю.; наук. кер. О.В. Ющенко. - Суми: СумДУ, 2018. - 155 с.
2. Directed self-assembly of Janus nanorods in binary polymer mixture: towards precise control of nanorod orientation relative to interface / К. Ху, R. Guo, B. Dong, L.-T. Yan // *Soft Matter*. 2012. V 37, № 8. P. 9581(8).
3. Janus Nanorods in Shearing-to-Relaxing Polymer Blends / W. Li, B. Dong, L.-T. Yan // *Macromolecules*. - 2013. - V. 46. - P. 7465 (12).
4. Kinetics modeling of nanoparticle growth on and evaporation off nanotubes / V. Privman, V. Gorshkov, Y. E. Yaish // *J. Appl. Phys.* 2017. - V. 121. - P. 014301 (8).
5. Stable Chimeras and Independently Synchronizable Clusters / Y. S. Cho, T. Nishikawa, A.E. Motter, *Phys. Rev. Lett.* - 2017. - V. 119. - P. 084101 (8).
6. Synthesis, properties and applications of Janus nanoparticles / M. Lattuada, T. A. Hatton // *Nano Today*. - 2011. - V. 6. - P. 286 (13).
7. Nanoscale forces and their uses in self-assembly / K. J. M. Bishop, E. Wilmer, S. Soh, B. A. Grzybowski // *Small*. - 2009. - V. 5. - P. 1600 (30).
8. Self-assembled metallic nanoparticle template - a new approach of surface nanostructuring at nanometer scale / A. Taleb, V. Ivanova // *Condens. Matter Phys.* - 2017. - V. 20. - P. 33804 (6).
9. Mapping Bright and Dark Modes in Gold Nanoparticle Chains using Electron Energy Loss Spectroscopy / S. J. Barrow, D. Rossouw, A. M. Funston, G. A. Botton, P. Mulvaney // *Nano Lett.* - 2014. - V.14. - P. 3799 (8).

10. Creating arbitrary quantum vibrational states in a carbon nanotube / A. Brandstetter-Kunc, G. Weick, C. A. Downing, D. Weinmann, R. A. Jalabert // *Phys. Rev. B.* - 2016. - V. 94. - P. 205432.
11. Magnetic properties of nanoparticle compacts with controlled broadening of the particle size distribution / M. S. Andersson, R. Mathieu, P. S. Normile, S. S. Lee, G. Singh, P. Nordblad, J. A. D. Toro // *Phys. Rev. B.* - 2017. - V. 95. - P. 184431.
12. Modelling the evaporation of nanoparticle suspensions from heterogeneous surfaces / C. Chalmers, R. Smith, A. J. Archer // *Condens. Matter Phys.* - 2017. - V. 29. - P. 295102.
13. Supramolecular self-assemblies as functional nanomaterials / E. Busseron, Y. Ruff, E. Moulin, N. Giuseppone // *Nanoscale.* - 2013. - V. 5. - P. 7098 (42).
14. Divalent metal nanoparticles / G. DeVries // *Science.* 2007. - V. 315. - P. 358 (3).
15. Electrical transport through self-assembled colloidal nanomaterials and their perspectives / C. Klinke // *EPL* - 2017. - V. 119. - P. 36002 (6).
16. Metal nanoparticle field-effect transistor / Y. Cai, J. Michels, J. Bachmann, C. Klinke // *J. Appl. Phys.* - 2013. - V. 114. - P. 034311.
17. Self-assembly of metal-polymer analogues of amphiphilic triblock copolymers / C. Klinke // *Nature Mater.* - 2007. - V. 6. - P. 609 (5).
18. Chains of Superparamagnetic Nanoparticles / K. Nakata, Y. Hu, O. Uzun, O. Bakr, F. Stellacci // *Adv. Mater.* - 2008. - V. 20. - P. 4294 (6).
19. Properties and emerging applications of self-assembled structures made from inorganic nanoparticles / N. Zhihong, A. Petukhova, E. Kumacheva // *Nature Nanotechnology.* - 2010. - V. 5. - P. 15 (10).
20. Laser-driven direct quantum control of nuclear excitations / R. Souza, W. J. M. Kort-Kamp, C. Sigaud, and C. Farina // *Physical Review A.* - 2011. - V. 84. - P. 052513.
21. One-Dimensional Assemblies of Nanoparticles: Preparation, Properties, and

- Promise / Z. Y. Tang, N. A. Kotov // *Adv. Mater.* 2005. - V. 17. - P.951 (12).
22. Engineering shape: the novel geometries of colloidal self-assembly / S. Sacanna, D. J. Pine, G.-R. Yi // *Soft Matter.* - 2013. - V. 9. - P. 8096 (11).
23. Using DNA to program the self-assembly of colloidal nanoparticles and microparticles // W. B. Rogers, W. M. Shih, V. N. Manoharan // *Nature Reviews Materials.* - 2016. - V. 1. - P. 16008.
24. Collective motion // T. Vicsek, A. Zafeiris // *Physics Reports.* - 2012. - V. 517. - P. 71 (70).
25. Collective motion of groups of self-propelled particles following interacting leaders / B. Ferdinandy, K. Ozog?ny, T. Vicsek, A. Zafeiris // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.* - 2017. - V. 479. - P. 467 (11).
26. Магнітні фазові переходи першого роду в нанокластерних системах в рамках наближення Ландау / О. В. Ющенко, А. Ю. Бадалян // *Журнал нано- та електронної фізики.* - 2017. - Т. 9, № 4.- С. 04022 (5сс).
27. Active Brownian motion tunable by light / I. Buttinoni, G. Volpe, F. Keummel, G. Volpe, C. Bechinger // *J. Phys.: Condens.Matter.* - 2012. - V. 24. - P. 284129.
28. Active Brownian Particles with Internal Energy Depot in: Traffic and Granular Flow '99: Social, Traffic, and Granular Dynamics Eds. D. Helbing, H.
29. J. Herrmann, M. Schreckenberg, D. E. Wolf, Traffic and granular flow'99 (Springer, Berlin, 2000).
30. Uphill motion of active brownian particles in piecewise linear potentials / F. Schweitzer, B. Tilch, W. Ebeling // *Eur. Phys. J. B.* - 2000. - V. 14. - P. 157.
31. Self-Organization, Active Brownian Dynamics, and Biological Applications / W. Ebeling, F. Schweitzer // *Nova Acta Leopoldina NF.* - 2003. - V. 88. - P. 169 (22).
32. Active Brownian Particles - From Individual to Collective Stochastic Dynamics / P. Romanczuk, M. Bar, W. Ebeling, B. Linder, L. Schimansky - Geier // *Eur. Phys. J. ST.* - 2012. - V. 202. - P. 1 (161).

33. B. Kerner, V. Krinskii, V. Osipov, Thermodynamics and Pattern Formation in Biology (de Gruyter, Berlin, 1988).
34. W. Alt, G. Hoffmann, Biological motion (Springer, Berlin, 1990).
35. Formation of stationary demarcation zones between population autowaves propagating towards each other / G. Ivanitskii, A. Medvinskii, M. Tsyganov, V. Shakhbazian, I. Kreteva // Physica D. - 1993. - V. 64. P 267.
36. From the dynamics of population autowaves generated by living cells to neuroinformatics / G. Ivanitskii, A. Medvinskii, M. Tsyganov // Physics Uspekhi. - 1994. - V. 37. - P. 961 (28).
37. Statistical Mechanics of Interacting Run-and-Tumble Bacteria / J. Tailleur, M. Cates // Phys.Rev.Lett. - 2008. - V. 100. - P. 218103.
38. Collective motion and density fluctuations in bacterial colonies / H.P. Zhang, A. Be'er, E.-L. Florin, H.L. Swinney // PNAS. - 2010. - V. 107. - P. 13626 (5).
39. Force-extension curves of bacterial flagella / R. Vogel, H. Stark // Eur. Phys. J. E. - 2010. V 33. - P. 259 (13).
40. Structure formation by active Brownian particles / L. Schimansky-Geier, M. Mieth, H. Rose, H. Malchow // Phys.Lett. A. - 1995. - V. 207. - P. 140 (7).
41. Diffusion in different models of active Brownian motion / B. Lindner, E.M. Nicola // Eur. Phys. J. ST. - 2008. - V. 157. - P. 43 (10).
42. Brownian dynamics of a microswimmer / V. Lobaskin, D. Lobaskin, I.M. Kulic // Eur. Phys. J. ST. - 2008. - V. 157. P. 149 (8).
43. When are active Brownian particles and run-and-tumble particles equivalent? Consequences for motility-induced phase separation / M.E. Cates, J. Tailleur // EPL. - 2013. - V. 101. - P. 20010.
44. Self-Organization in Collective Behaviour of Active Nanoparticles / O.V. Yushchenko, A.Sh. Baranova // J. Nano-Electron. Phys. - 2010. - V. 2. - P. 7 (25).
45. Active brownian motion of pairs and swarms of particles / w. Ebeling // acta

- physica polonica b. - 2007. - V. 38. - P. 1657 (15).
46. Swarm dynamics, attractors and bifurcations of active Brownian motion / W. Ebeling, L. Schimansky-Geier // Eur. Phys. J. ST. - 2008. - V. 157. - P. 17 (15).
  47. Modelling collective opinion formation by means of active Brownian particles / F. Schweitzer, J.A. Holyst // Eur. Phys. J. B. - 2000. - V. 15. - P. 723 (10).
  48. Brownian dynamics of a self-propelled particle in shear flow / B. Hagen, R. Wittkowski, H. L owen // Phys.Rev. E. - 2011. - V. 84. - P. 031105.
  49. Swarms with canonical active Brownian motion / A. Gl uck, H. H uffel, S. Ilijic // Phys. Rev. E. - 2011. - V. 83. - P. 051105.
  50. Berg H.C., Random Walks in Biology (University Press, Princeton, 1993).
  51. V.I. Arnold, Mathematical Methods of Classical Mechanics,(Springer-Verlag, Berlin, 1989).
  52. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Quantum Machanics. Nonrelativistic theory, (Elsevier Science Ltd., Oxford, 1991).
  53. Self-organization, active brownian dynamics, and biological applications / W. Ebeling, F. Schweitzer // cond-mat/0211606 v1.
  54. Axiomatic theory of self-organizing system / Olemskoi A.I. // Physica A. - 2002. - V. 310. - P. 223(10).
  55. Colltctive motion of active particles / A. I. Olemskoi, O. V. Yushchenko // Russian Physics Journal. - 2004. - Vol.47, № 4. - P. 453(8).
  56. van der Waals forces in density functional theory: a review of the vdW-DF method / K. Berland, V. Cooper, K. Lee, E. Schr?der, T. Thonhauser, P. Hyldgaard, B. Lundqvist // Rep. Prog. Phys. - 2015. - V. 78. - P. 066501.
  57. A New Conception of Supraconductivity / F. London // Nature. - 1937. - V. 140. - P. 793 (4).
  58. Р. Балеску, Равновесная и неравновесная статистическая механика, (Мир, Москва, 1978).
  59. C. Tsallis, Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics. Approaching

- a Complex World, (Springer, New York, 2009).
60. Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics / C. Tsallis // J. Stat. Phys. - 1988. - V. 52. - P. 479 (9).
  61. Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics / E. M. Curado, C. Tsallis // J. Phys. A. - 1991. - V. 24. - P. L69.
  62. A note on the q-deformation-theoretic aspect of the generalized entropies in nonextensive physics / S. Abe // Phys. Lett. A. - 1997. - V. 224. - P. 326 (5).
  63. Correlation function studies on the Domany-Kinzel cellular automaton / C. Tsallis, R. S. Mendes, A. R. Plastino // Physica A. - 1998. - V. 261. - P. 534 (10).
  64. Statistical mechanics in the context of special relativity / G. Kaniadakis // Phys. Rev. E. - 2002. - V. 66. - P. 056125.
  65. Stabilities of generalized entropies / G. Kaniadakis, M. Lissia, A. M. Scarfone // Phys. A. - 2004. - V. 37. - P. 10513.
  66. Boltzmann entropy and the microcanonical ensemble / J. Naudts // EPL. - 2005. - V. 69. - P. 719.
  67. Thermodynamic equilibrium and its stability for microcanonical systems described by the Sharma-Taneja-Mittal entropy / A. M. Scarfone, T. Wada // Phys. Rev. E. - 2005. - V. 72. - P. 026123.
  68. Classical q-deformed dynamics / A. Lavagno, A. M. Scarfone, N.P. Swamy // Eur. Phys. J. B. - 2006. - V. 50. - P. 351 (4).
  69. Basic-deformed thermostatics / A. Lavagno, A.M. Scarfone, N.P. Swamy // Phys. A. - 2007. - V. 40. - P. 8635.
  70. F. Wilczek, Fractional statistics and anyon superconductivity, (World Sci., Singapore, 1990).
  71. The quantum groupe SU (2) and the q -analogue of boson operators / L. C. Biedenharn // Phys. A. - 1989. - V. 22. - P. 873 (6).
  72. A. J. Macfarlane // J. Phys. A. - 1989. - V. 22. - P. 4581.
  73. Squeezing and quantum groups / E. Celeghini, M. Rasetti, G. Vitiello //

- Phys. Rev. Lett. - 1991. - V. 66. - P. 2056.
74. Uber die Reihe / E. Heine // J. reine angew. Math. - 1846. - V. 32. - P. 285.
75. Transformations of q-series / H. Jackson // Mess. Math. - 1910. - V. 39. - P. 145 (9).
76. H. Exton, q-Hypergeometric Functions and Applications, (Ellis Horwood, New York, 1983).
77. C. Kassel, Quantum Groups, Graduate Texts in Mathematics, (Springer, New York, 1995).
78. Thermostatistics of a q-deformed boson gas / A. Lavagno, N.P. Swamy // Phys. Rev. E. - 2000. - V. 61. - P. 1218.
79. D. Sornette, Critical Phenomena in Natural Sciences. Chaos, Fractals, Selforganization and Disorder: Concepts and Tools, (Springer, Berlin, 2006).
80. q-analysis of Fractal Sets / A. Erzan, J.-P. Eckmann // Phys. Rev. Lett. - 1997. - V. 78. - P. 3245.
81. Finite q-differences and the discrete renormalization group / A. Erzan // Phys. Lett. A. - 1997. - V. 225. - P. 235.
82. Tsallis thermostatistics for finite systems: a Hamiltonian approach / A. B. Adiba, A. A. Moreirab, J. S. Andrade Jr., M.P. Almeida // Phys. A. - 2003. V 322. P 276.
83. S. Abe, Y. Okamoto (eds.), Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications, Papers from the IMS Winter School on Statistical Mechanics: Nonextensive Generalization of Boltzmann-Gibbs Statistical Mechanics and its Applications (Springer, Berlin, 2001).
84. А. А. Абрикосов, А. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, (ГИФМЛ, Москва, 1962).
85. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсиро-ванного состояния, (Физматлит, Москва, 2002).
86. J. Zinn-Justin, Quantum Field Theory and Critical Phenomena, (Clarendon Press, Oxford, 1993).



87. Statistical field theories deformed within different calculi / A. I. Olemskoi, S. S. Borysov, I. A. Shuda // *Eur. Phys. J. B.* - 2010. - V. 77. - P. 219.
88. Statistical theory of self-similarly distributed fields / A. I. Olemskoi, I. A. Shuda // *Phys. Lett. A.* - 2009. - V. 373. - P. 4012 (4).
89. H. Risken, *The Fokker-Planck Equation. Methods of Solution and Applications*, (Springer, Berlin, 1984).
90. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, (Физматлит, Москва, 2002).
91. Обобщенная информационная энтропия и неканоническое распределение в равновесной статистической механике / Ю.Г. Рудой // *ТМФ.* - 2003. - V. 135. - P. 3 (54).
92. М. Абрамовиц, И. Стиган, *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами*, (Наука, Москва, 1979).
93. Self-similarity degree of deformed statistical ensembles / A. I. Olemskoi, A. S. Vaylenko, I. A. Shuda // *Phys. A.* - 2009. - V. 388. - P. 1929 (10).
94. Gravo-thermal catastrophe and Tsallis' generalized entropy of self-gravitating systems / A. Taruya, M. Sakagami // *Physica A.* - 2002. - V. 307. - P. 185.
95. Non-extensive statistics, fluctuations and correlations in high-energy nuclear collisions / A. Lavagno, W. Alberico, P. Quarati // *Eur. Phys. J. C.* - 2000. - V. 12. - P. 499 (8).
96. Nonextensive thermostistical investigation of the blackbody radiation / I. Sokmen, F. Buyukkili, D. Demirhan // *Chaos, Solitons and Fractals.* - 2002. - V. 13. - P. 749 (11).
97. Мікроскопічний опис неекстенсивних систем у рамках моделі Ізінга / О. В. Ющенко, А. Ю. Бадалян // *Український фізичний журнал.* - 2013. - Т. 58, № 5. - С.497 (7).
98. q-Thermostatistics and the black-body radiation problem / S. Martinez, F. Pennini, A. Plastino, C. Tessone // *Physica A.* - 2002. - V. 309. - P. 85.

99. Fluxes of cosmic rays: a delicately balanced stationary state / C. Tsallis, J.C. Anjos, E.P. Borges // *Phys. Lett. A.* - 2003. - V. 310. - P. 372 (5).
100. Generalized statistics and high-Tc superconductivity / H. Uys, H.G. Miller, F.C. Khanna // *Phys. Lett. A.* - 2001. - V. 289. - P. 264 (9).
101. Analysis of velocity derivatives in turbulence based on generalized statistics / N. Arimitsu, T. Arimitsu // *Europhys. Lett.* - 2002. - V. 60. - P. 60.
102. R. Brout, New York-Amsterdam: University, 413 (1965).
103. Evolution of the system with multiplicative noise / D. Kharchenko, A. Olemskoi // *Physica A.* - 2001. - V. 293. - P. 178 (12).
104. Нанокластеры и нанокластерные системы. Организация, взаимодействие, свойства / И.П. Суздаев, П.И. Суздаев // *Усп. Хим.* - 2001. - Т. 70. С 3 (43).
105. Формирование и свойства системы нанокластеров оксида железа / И.П. Суздаев, Ю.В. Максимов, В.Н. Буравцев, В.К. Имшенник, А.Г. Казакевич, С.В. Новичихин // *Коллоид. журн.* - 2000. - Т. 62. - С. 257 (10).
106. И.П. Суздаев, В.Н. Буравцев, Ю.В. Максимов, В.К. Имшенник, В.В. Матвеев, С.В. Новичихин // *Хим. физ.* - 2000. - Т. 19. - С. 105.
107. Magnetic Disorder as a First-Order Phase Transformation / C.V. Bean, D.S. Rodbell // *Phys. Rev.* - 1962. - V. 126. - P. 104.