

# Содержание

<b>Предисловие редактора перевода</b>	<b>9</b>
<b>Предисловие автора</b>	<b>13</b>
0.1 Кому предназначена эта книга, и почему . . . . .	13
0.2 Необходимые пояснения . . . . .	14
0.3 Благодарности . . . . .	15
<b>Глава 1. Введение</b>	<b>17</b>
1.1 Фазовые переходы и термодинамика Малых систем . . . . .	17
1.2 Подсказка Больцмана . . . . .	21
1.3 Описание неэкстенсивных систем с помощью микроканонической термодинамики . . . . .	23
1.3.1 Нарушение однородности системы при фазовых переходах первого рода . . . . .	24
1.3.2 Сохраняющиеся величины как естественные параметры	26
1.3.3 Микроканоническая термодинамика — новый, эффективный и естественный способ расчета основных параметров фазовых переходов . . . . .	27
1.3.4 Фрагментация — новый тип перехода в конечных системах . . . . .	28
1.3.5 Необходимость использования микроканонического распределения при наличии дальнего действия . . . . .	29
1.4 Некоторые реальные системы: ядра и атомные кластеры . .	30
1.4.1 Чем Микроканонический метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса лучше метода Молекулярной Динамики . . . . .	30
1.4.2 Смысл вымороженного объема: как распадающаяся конечная система может перейти в равновесное состояние . . . . .	31
1.5 Структура книги . . . . .	32

<b>Глава 2. Механические основы термодинамики</b>	<b>37</b>
2.1 Основные определения . . . . .	37
2.2 Термодинамический предел: глобальная вогнутость $s(e, n)$ .	40
2.3 Фазовые переходы с микроканонической точки зрения . . .	41
2.3.1 Микроканонические признаки фазовых переходов . .	45
2.3.2 Поверхностное натяжение на границах . . . . .	48
2.4 Второе начало термодинамики и энтропия Больцмана . . . .	48
2.4.1 Выпуклая энтропия — нарушение второго начала? .	50
2.4.2 Рост энтропии Больцмана и постоянство энтропии Гиббса в неравновесной системе . . . . .	51
2.4.3 Геометрическая трактовка термодинамики Вейнхольда	53
<b>Глава 3. Исследование микроканонической термодинамики фазовых переходов в модели Поттса</b>	<b>55</b>
3.1 Введение . . . . .	55
3.2 Поверхностное натяжение в модели Поттса [139] . . . . .	56
3.2.1 Зависимость от размера системы, преимущество микроканонического скейлинга над каноническим . . . .	57
3.2.2 Теплоемкость при микроканоническом подходе . . . .	61
3.3 Топология поверхности энтропии $S(E, N)$ в решеточных газах Поттса [144] . . . . .	64
3.3.1 Качественный анализ . . . . .	64
3.3.1.1 Модель Изинга . . . . .	65
3.3.1.2 Решеточная модель газа . . . . .	67
3.3.1.3 Разбавленная модель Поттса с $q = 3$ . . . . .	68
3.3.2 Метод численного моделирования . . . . .	70
3.3.3 Результаты . . . . .	71
3.3.3.1 О топологии кривизны . . . . .	74
3.3.3.2 Параметр порядка при фазовом переходе . .	80
3.3.3.3 Потеря информации при описании с помощью большого канонического распределения	80
3.3.4 Выводы . . . . .	81
3.4 О происхождении изолированных критических точек и критических кривых . . . . .	86
3.4.1 Модель Изинга в двухчастичном приближении метода вариации кластера . . . . .	88
3.4.1.1 Микроканоническая классификация фазовых переходов . . . . .	95
3.4.1.2 Ферромагнитная (FM) модель Изинга . . . .	101

3.4.1.3	Антиферромагнитная (AFM) модель Изинга. Линия перехода второго рода как признак перехода первого рода по не сохраняющемуся параметру порядка $\lambda$ . . . . .	103
3.4.1.4	Выводы . . . . .	106
3.4.2	Обычная модель Поттса с $q = 3$ в приближении плиток	107
<b>Глава 4. Переход жидкость–газ и поверхностное натяжение при постоянном давлении</b> . . . . . <b>113</b>		
4.1	Система Андерсена при постоянном давлении . . . . .	113
4.2	Микроканонический ансамбль с заданным давлением. Энтальпия . . . . .	114
4.2.1	Поршень, на который действует постоянная внешняя сила $\Pi$ . . . . .	116
4.3	Переход жидкость–газ в реальных металлических системах . . . . .	117
4.3.1	Микроканоническое описание перехода жидкость–газ при постоянном давлении . . . . .	118
4.3.2	Переход жидкость–газ в натрии, калии и железе [143] . . . . .	120
4.3.3	Более точное приближение для описания поверхностной степени свободы малых кластеров жидкого натрия . . . . .	127
4.3.4	Поведение вблизи критической точки . . . . .	129
4.4	Сравнение с методом ансамблей Гиббса . . . . .	131
4.5	Другие микроскопические методы расчета поверхностного натяжения . . . . .	133
4.6	Недостатки и необходимые улучшения численного метода . . . . .	134
4.7	Заключение . . . . .	136
<b>Глава 5. Статистическая фрагментация при наличии дальнедействующих сил отталкивания</b> . . . . . <b>139</b>		
5.1	Введение . . . . .	139
5.2	Трехмерные силы большого радиуса действия: сила Кулона . . . . .	141
5.2.1	Фрагментация ядер . . . . .	141
5.2.1.1	За счет чего происходит переход в равновесное состояние? Какую информацию можно получить из ядерного трения? [134] . . . . .	141
5.2.1.2	«Синхронная» или последовательная статистическая фрагментация? . . . . .	145
5.2.1.3	Фрагментация как фазовый переход . . . . .	153

5.2.1.4	Новые подтверждения фазового перехода в эксперименте по испарению ядер . . . . .	155
5.2.1.5	Определение микроканонической теплоемкости по флуктуациям кинетической энергии фрагментов . . . . .	163
5.2.1.6	Параметр порядка для мультифрагментации	166
5.2.1.7	Корреляции $N$ фрагментов . . . . .	166
5.2.1.8	Корреляционные функции для фрагментов промежуточной массы . . . . .	167
5.2.1.9	Зависимость от энергии возбуждения . . . . .	169
5.2.1.10	Как по форме корреляционных функций отличить один вид мультифрагментации от другого . . . . .	172
5.2.1.11	Образование «планетных систем» и «пюре»	172
5.2.1.12	Двухчастичная мультифрагментация . . . . .	174
5.2.1.13	Заключительные замечания по корреляциям фрагментов промежуточной массы . . . . .	177
5.2.2	Фрагментация заряженных атомных кластеров . . . . .	179
5.2.2.1	Введение . . . . .	179
5.2.2.2	Первый пример: кластеры натрия . . . . .	182
5.2.2.3	Микро/макро-подход: как найти плотность энергетических уровней внутренних степеней свободы при сильной ангармоничности вблизи точки плавления? . . . . .	183
5.2.2.4	Скорость испарения и $e_{max}$ . . . . .	186
5.2.2.5	Фазовый переход к кластерной фрагментации	189
5.2.2.6	Корреляционные функции для массы и заряда	191
5.2.2.7	Отличия распада кластеров $Sb^{++}$ от случая щелочных металлов . . . . .	194
5.2.2.8	Заключительные замечания по статистической фрагментации горячих атомных кластеров . . . . .	200
5.3	Двумерные дальнедействующие силы: горячие ядра с быстрым вращением [50] . . . . .	202
5.4	Выводы . . . . .	209

6.1	Одномерный и двумерный случаи. Модель гамильтонова среднего поля: примитивная модель фазовых переходов в самогравитирующей системе . . . . .	216
6.1.1	Оценка для седловой точки при большом $N$ . . . . .	218
6.1.2	Одномерный случай . . . . .	221
6.1.3	Двумерный случай . . . . .	222
6.1.4	Выводы . . . . .	227
6.2	Коллапс в неэкстенсивных (гравитационных) системах с учетом сохранения момента импульса . . . . .	227
6.2.1	Дискретизация с помощью ячеек . . . . .	230
6.2.2	Приближение среднего поля . . . . .	232
6.2.3	Модель Тирринга с учетом момента импульса . . . . .	234
<b>Приложение А. История развития статистических моделей ядерной мультифрагментации</b>		<b>241</b>
A.1	Разбиение: арифметическое или квантовое . . . . .	245
<b>Приложение Б. Микроканонический ансамбль кластеров натрия</b>		<b>247</b>
B.1	Микроканонический алгоритм Метрополиса . . . . .	252
B.2	Основные микроканонические весовые коэффициенты . . . . .	254
B.2.1	Весовой коэффициент $w_\varphi$ . . . . .	255
B.2.2	Весовой коэффициент $w_m$ . . . . .	255
B.2.3	Весовой коэффициент $w_{NZ}$ . . . . .	257
B.2.4	Весовой коэффициент $w_r$ . . . . .	257
B.2.5	Выбор значений энергии возбуждения $\{E_j^*\}_1^{N_f}$ и весовых коэффициентов $w_{qd}, w_{qt}, w_{qb}$ . . . . .	258
B.2.6	Димеры и тримеры . . . . .	259
B.2.7	Крупные фрагменты . . . . .	260
B.2.8	Разложение $\mathbf{I}_F$ и весовой коэффициент $w_{pl}$ . . . . .	261
B.3	Выполнение шага алгоритма Метрополиса . . . . .	264
<b>Приложение В. Некоторые технические подробности моделирования с помощью микроканонического метода Монте-Карло на решетке</b>		<b>267</b>
V.0.1	Прямое построение выборки . . . . .	267
V.0.2	Использование сетки с локальными окрестностями . . . . .	268
V.0.3	С учетом дополнительного веса $W_0(A_1, \dots, A_Q)$ . . . . .	269

---

В.0.4 Итерационный метод регулировки дополнительного веса $W_0(A_1, \dots, A_Q)$ . . . . .	270
В.1 Пример: разбавленная модель Поттса . . . . .	273
<b>Список литературы</b>	<b>277</b>
<b>Предметный указатель</b>	<b>299</b>