

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редакторов перевода	5
Предисловие	7
1. Введение. Общие вопросы теории и техники статистического моделирования методом Монте-Карло. К. Биндер	9
1.1. Назначение метода Монте-Карло	9
1.2. Метод Монте-Карло в классической и статистической механике	12
1.2.1. Вычисление статических средних по каноническому ансамблю	12
1.2.2. Оценка свободной энергии. Практическая реализация. Другие ансамбли	16
1.2.3. Динамическая интерпретация процесса моделирования методом Монте-Карло	22
1.2.4. Вопросы точности: псевдослучайные числа, усреднение по конечному интервалу времени, начальные условия и т. д.	26
1.2.5. Выбор граничных условий	33
1.2.6. Задачи с конечными размерами системы. Экстраполяция на термодинамический предел	37
1.3. Некоторые вопросы моделирования кинетических процессов	42
1.3.1. Различные реализации методом Монте-Карло уравнения (1.19)	42
1.3.2. Вычисления с законами сохранения. «Гидродинамическое» замедление	46
1.3.3. Замедление при фазовых переходах. Как оценить порядок перехода	48
1.4. Модификации метода Монте-Карло	50
1.4.1. Приближение Александровича	50
1.4.2. Техника группы перенормировок с использованием метода Монте-Карло	52
1.5. Выводы	54
Литература	55
2. Моделирование классических жидкостей. Д. Левек, Ж.-Ж. Вейс и Ж. П. Ансен	58
2.1. Общее представление	58
2.2. Разрывные потенциалы и потенциалы с жесткой сердцевиной	60
2.2.1. Система твердых сфер	60
2.2.2. Твердые сферы с разрывным короткодействующим потенциалом	71
2.2.3. Двумерные системы	74
2.3. Плавные короткодействующие потенциалы	78
2.3.1. Степенные потенциалы	78
2.3.2. Потенциал Леннарда-Джонса	80
2.3.3. Двумерная ЛД-система	86
2.4. Ионные системы	86
2.4.1. Общие положения	86
2.4.2. Полностью ионизованное вещество	90
2.4.3. Простая модель и ее применение	96
2.4.4. Расплавленные соли	101
2.4.5. Жидкие металлы	105
2.5. Молекулярные жидкости	107
2.5.1. Твердые выпуклые тела	109
2.5.2. Атом-атомные потенциалы	113
2.5.3. Обобщенные потенциалы Стокмайера	119
9.26, K. Binder, D. Stauffer, V. Wildpaner: Acta Met. 23, 1191 (1975).	128

3. Фазовые диаграммы смесей и магнитных систем. Д. Лэндоу	138
3.1. Обычные фазовые переходы в магнетиках и бинарных сплавах	138
3.1.1. Модель Изинга	139
3.1.2. Магнитные системы с изотропными взаимодействиями	145
3.2. Мультикритические точки и переходное поведение	149
3.2.1. Трикритические явления	149
3.2.2. Бикритические и другие мультикритические свойства	152
3.3. Фазовые переходы в смешанных системах	156
3.4. Заключение	158
Литература	158
4. Квантовые многочастичные задачи. Д. Сиперли и М. Кейлос	162
4.1. Вводные замечания	162
4.2. Вариационные методы	163
4.2.1. Методы Монте-Карло для пробной функции	166
4.2.2. Применение к гелиевым системам	173
4.2.3. Другие бозе-системы	182
4.2.4. Ферми-жидкости	187
4.2.5. Техника Монте-Карло для низкотемпературных возбуждений	192
4.3. Почти классические системы	193
4.4. Метод Монте-Карло для функций Грина (GFMC)	194
4.4.1. Результаты	205
4.5. Вириальные коэффициенты и парные корреляции	209
4.6. Заключение	211
Литература	212
5. Моделирование малых систем. Х. Мюллер-Крумбахар	216
5.1. Вводные замечания	216
5.2. Статика	218
5.2.1. Кластеры в непрерывных пространствах	218
5.2.2. Решеточные модели	221
5.3. Динамика кластеров	236
5.3.1. Фазовые переходы первого рода	236
5.3.2. Фазовые переходы второго рода	238
Приложение. Алгоритм расчета кластеров	240
Литература	244
6. Исследование явлений релаксации методом Монте-Карло. Кинетика фазовых изменений и критическое замедление. К. Биндер, М. Кейлос	247
6.1. Вводные замечания	247
6.2. Кинетика флуктуаций при тепловом равновесии	250
6.2.1. Динамика моделей для молекулярных цепей	250
6.2.2. Критическое замедление в системах без закона сохранения	252
6.2.3. Релаксация в системах с сохраняющимися величинами	255
6.2.4. Динамика в мультикритической точке	258
6.2.5. Динамика кластеров; их скорость реакции и коэффициент диффузии	259
6.3. Кинетика нелинейной релаксации	262
6.3.1. Нелинейное критическое замедление	262
6.3.2. Кинетика зародышеобразования при фазовых переходах первого рода	264
6.3.3. Кинетика спинодального разделения и рост зерен в сплавах	273
6.4. Выводы и перспективы	279
Литература	284

7. Моделирование роста кристаллов методом Монте-Карло. Х. Мюллер-Крумбахар	287
7.1. Вводные замечания	287
7.2. Поверхности кристалла в условиях равновесия	290
7.2.1. Сингулярные грани	290
7.2.2. Поверхностные ступеньки	295
7.2.3. Переход в состояние шероховатости	296
7.3. Кинетика роста	299
7.3.1. Общие вопросы моделирования кинетики роста кристаллов	299
7.3.2. Грани с малыми индексами	301
7.3.3. Поверхностные ступеньки	310
7.3.4. Переход в состояние шероховатости	316
7.3.5. Многокомпонентные кристаллы и сегрегация примесей	319
7.4. Перспективы	321
Литература	325
8. Исследование неупорядоченных систем методом Монте-Карло. К. Биндер и Д. Штауффер	329
8.1. Примеси с малой концентрацией в магнетиках	330
8.2. Разбавленные ферромагнетики и перколяционная задача	332
8.2.1. Термодинамические свойства при ненулевых температурах	332
8.2.2. Кластерные числа в задаче перколяции при нулевой температуре	334
8.2.3. Кластерные поверхности и корреляции	341
8.2.4. Проводимость и спиновые волны	343
8.2.5. Разные вопросы	345
8.3. Спиновые стекла	346
8.3.1. Физические свойства спиновых стекол	347
8.3.2. Распределение взаимодействий и эффективных полей	349
8.3.3. Восприимчивость и удельная теплоемкость	349
8.3.4. Намагниченность и параметры порядка	352
8.3.5. Кинетические явления	356
8.3.6. Свойства системы в основном состоянии	356
8.4. Неупорядоченные гетерополимеры и переход спираль — клубок	358
8.5. Структурно неупорядоченные твердые тела	360
8.6. Заключение	363
Литература	365
9. Приложения в физике поверхностей. Д. Лэндоу	369
9.1. Вводные замечания	369
9.2. Критические свойства магнитных систем с поверхностями	370
9.3. Поверхностные эффекты в бинарных сплавах	376
9.3.1. Поверхностное обогащение	376
9.3.2. Поверхностные критические явления	379
9.4. Фазовые переходы в адсорбированных поверхностных слоях	380
9.4.1. Модели решеточного газа	380
9.4.2. Непрерывные модели	385
9.5. Кинетические явления на поверхностях	385
9.6. Выводы	386
Литература	387
Добавление в корректуре к оригинальному изданию	389