

Кратко описание (справка)

на най-важните постижения

на проф. дн Даниел Маринов Данчев
по конкурса за избор на чл. кореспонденти (дописни членове) на БАН
в научно направление - *Математически науки*

Основните ми приноси са свързани с

- I. математическото моделиране в областта на статистическата механика и по-точно получаване на нови точни решения за основни модели в нея и за техни свойства от съществен интерес не само за:

A. теорията – публикации М, [1-44], [49-53], [60,61,64], [66-70], [72-76], [83], [87,88], [92], [94,95], [101,102,103];

но и за

B. нанотехнологиите – публикации [27,30,31,34,35,37,74];

- II. математическо моделиране на параметрите на човешкото тяло и движението на човека - публикации [45-48], [54-59], [62,63,65], [71], [77-82], [84-86], [89-91], [93], [96-100].

I. A.

Актуалност на областта в която са проведени изследванията

Всички 72 публикации в тази група представляват изследване на математически модели, които описват чрез методите на статистическата механика конкретни физически свойства на реални или идеализирани вещества (системи), а така също и на експериментално наблюдаеми физични явления и сили в тях. В своето огромно болшинство разглежданите системи са **крайно-размерни** – т.е., един или няколко размера на системата са крайни. Това е една съвременна област започваща от 70-те години на 20 век и днес особено актуална заради развитието на микро- и нано-технологиите, налагащи изследването на ниско-размерни системи. Това математически е значително по-сложно, отколкото при класическите разглеждания на обемни системи, защото изисква разработването на специални математически техники.

В частност крайно-размерните системи могат да са тънки течни филми, верижки (нишки) или напълно крайни системи (които пък са от особен интерес за численото моделиране на реални физични системи). С развитието на нано-технологиите практическата важност на такъв род изследвания получи особено значение. Последното се отнася с особена сила за ефекта на Казимир поради който две повърхности разделящи флукутираща среда се привличат или отблъскват със сила, която зависи и от разстоянието L между тези повърхности (при това тази сила е съществена и не може да бъде пренебрегната при микро- и нано-разстояния). Понастоящем силите на Казимир, в различните си варианти, са обект на изследване в квантовата електродинамика,

квантовата хромодинамика, космологията, физиката на кондензираната материя, биологията и, някои аспекти от тях, в микро- и нано-технологиите.

Обща характеристика на проведените изследвания

В теорията разгледаните модели могат да бъдат решетъчни (т.е. дефинирани върху d -мерна целочислена решетка – крайна в някои направления, или безкрайна) или континуални (полеви) модели.

Основната част от изследваните явления се наблюдават в околност на непрекъснат фазов преход (фазов преход от “втори род”), или в околност на фазов преход от първи род. Такива явления се описват в рамките на равновесната статистическа механика, която се основава на Гибсовите статистически ансамбли. В този подход взаимните вероятностни разпределения на динамичните променливи (случайните величини) са разпределения на Гибс $\sim \exp[-\beta \mathcal{H}]$, където \mathcal{H} е Хамилтониана на системата и $\beta \propto 1/T$ е параметър обратно пропорционален на температурата T . Нормировката на тези разпределения (статистическата сума) е свързана по определен начин с някой от термодинамичните потенциали на системата. В границата когато обемът V и броят N на динамичните променливи (случайни величини) клони към безкрайност при фиксирана плътност N/V (т.е. в термодинамичната граница) термодинамичните потенциали притежават сингулярни (неаналитични) особености, геометричното място на които определя фазовата диаграма на системата. Разликата между две съ-съществуващи си фази (примерно течност и пари) изчезва в критичната точка на системата, в околност на която сингулярното поведение на термодинамичния потенциал се описва с критични индекси, а корелационната дължина характеризираща двучастичните корелационни функции на случайните величини клони към безкрайност. Критичните индекси са универсални за всички системи с една и съща размерност, симетрия на подреденото състояние и далекодействие на взаимодействията в системата (хипотеза за универсалност). Когато системата е крайна тези сингулярности са “размазани” (закръглени), като е леко отместена (спрямо безкрайната система) и стойността на температурата T (и евентуално на други термодинамични параметри) при които съответната величина, например свиваемостта (дисперсията на сумата от случайни величини нормирана по подходящ начин), има максимум в крайната система. От особен интерес е описанието на “формирането на сингулярността” когато (поне един от) размерите на системата са големи, но крайни, както и предсказване на позицията на екстремумите (обикновено максимумите) на наблюдаемите величини в пространството на термодинамичните параметри.

Моделите, които са изследвани, са обикновено дефинирани върху d -мерна хиперкубична решетка Z^d . Предполага се, че във всеки решетъчен възел $i \in \Lambda \subset Z^d$ (където областта Λ на решетката съдържа краен брой $N = |\Lambda|$ свързани помежду си възли на решетката) е разположен n -компонентен случаен вектор \mathbf{S}_i с единична дължина $|\mathbf{S}_i| = 1$ с компоненти \mathbf{S}_i^α , $\alpha = 1, \dots, n$. Взаимодействието в системата се описва с Хамилтониан $\mathcal{H} = -\sum_{i,j} J_{i,j}^{\alpha,\beta} \mathbf{S}_i^\alpha \mathbf{S}_j^\beta$. При това са разгледани както случаи на анизотропия – например диполно взаимодействие, така и случая на изотропна система – когато Хамилтониана е ротационно-инвариантен в n -мерното “спиново” пространство, т.е., с $O(n)$ симетрия. В последния случай при $n = 1, 2, 3$ получаваме изотропните модели на Изинг ($n=1$), ХУ ($n=2$) и Хайзенберг ($n=3$). Освен класически са разгледани и квантови модели, но поради невъзможността тяхното прецизно дефиниране да бъде представено на разумно малко пространство отправяме заинтересувания читател към конкретните публикации, където моделите са представени в детайли. Разгледани са както модели с изотропно

близкодействие – когато $J_{i,j}^{\alpha,\beta} \equiv J_{i,j} = J$ само ако възлите са най-близки съседи (т.е. $J_{i,j}^{\alpha,\beta} \equiv J_{i,j} = 0$ в противен случай), така и модели с далекодействие – когато взаимодействието спада асимптотично с разстоянието $r = |\mathbf{r}|$ между динамичните променливи като $J_{i,j}^{\alpha,\beta} \equiv J(r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \propto r^{-d-\sigma}$, където $\sigma > 0$ е реален параметър характеризиращ степента на далекодействие (ако $0 < \sigma < 2$ говорим за “водещо далекодействащо взаимодействие”; ако $2 < \sigma$ говорим за “недоминиращо далекодействащо взаимодействие”).

Математическа основа на проведените изследвания

Математическите методи прилагани за изследване на фазови преходи в крайни системи са най-разнообразни и зависещи от спецификата на модела. Тези използвани от мен включват: изследване на гранични Гибсови разпределения на определени блочни случайни величини прилагайки апарата и методите на теория на вероятностите за полета от зависими случайни величини; асимптотични разложения – изследване на асимптотичното поведение на d -мерни крайни суми като се използват интегрални представяния с ядра определени специални функции (например на Миттаг-Лефлер) и техните обобщения; числени методи – Монте Карло (за моделиране на d -мерни статистико-механични системи) и Нютон-Канторович (за решаване на системи от порядъка на 8000 нелинейни свързани уравнения описващи, например, профила на параметъра на подреждане в тънък течен филм), и други. За непрекъснатите модели се използва апарата на диференциалните уравнения, включително решение на нелинейно-диференциално уравнения от втори род с полиномна нелинейност от 3-та (Φ^4 модел на Гинзбург-Ландау) или 5-та степен (Ψ -теорията на Гинзбург за ^4He). Разбира се, свойствата на специалните функции са необходими както за решетъчни, така и за непрекъснати модели.

Основни резултати в публикуваните научни работи:

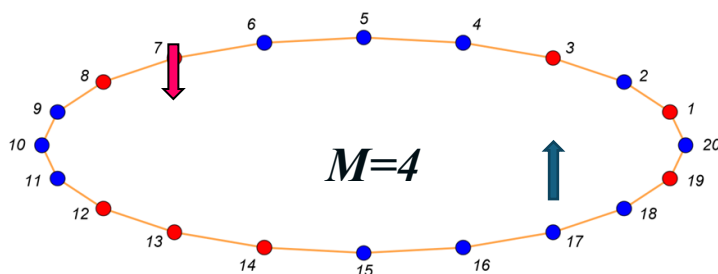
1) *В публикацията по покана [92] е направен изчерпателен обзор и са представени някои наши нови резултати получени в периода след излизането на монографията М за поведението на критичния ефект на Казимир на базата на точни аналитични резултати на статистико-механични модели.*

В обзора са обхванати както класически, така и квантови системи: едномерни Изинг, ХУ, и Хайзенберг модели, двумерния Изинг модел, средно-полеви модели на системи с геометрия на тънък филм, d -мерни Гаусов и сферичен (класически и квантов) модели, Бозе газ (идеален, и не, както и релативистки). Специално внимание е отделено на влиянието на граничните условия върху поведението на силата на Казимир. Основно са разгледани геометрия на тънък филм, на сфера взаимодействаща с повърхност и на взаимодействие на две сфери. За да направим изложението самосъгласувано, сме изложили накратко и теорията на фазовите преходи и критичните явления в класически и квантови системи, както и теорията на крайно-размерното подобие. Представено е и значението на получените точни резултати за правилното разбиране на експерименталните факти. Представено е и възможни практически приложения на изложените резултати. В ревюто са обхванати както класически, така и квантови системи: едномерни Изинг, ХУ, и Хайзенберг модели, двумерния Изинг модел, средно-полеви модели, d -мерния Гаусов и сферичен (класически и квантов) модели, Бозе

газ (идеален, неидеален, както и релятивистки). Специално внимание е отделено на влиянието на граничните условия върху поведението на силата на Казимир.

Тази публикация бе избрана за най-значимо научно постижение на Института по Механика за 2023 година и влезе като такава в годишния отчет на БАН.

- 2) *Точни резултати за статистическата сума за модел на Изинг в ансамбъл с фиксирано намагнитване – виж [88, 95, 101, 103].*



Преди около 100 години, през 1920 г., Вилхелм Ленц предлага модел, който е решен през 1924 г. от неговия ученик Ернст Изинг в големия каноничен ансамбъл за случая на едномерна верижка. Моделът днес е известен като

модел на Изинг. Оттогава и въпреки някои опити, не бе налице аналитичен резултат за поведението на едномерния модел на Изинг, когато общата му намагнитване (т.е., примерно, броят на насочените нагоре магнитни моменти (spins) минус броя на насочените надолу магнитни моменти, или с колко броят на сините частици е по-голям от тези на червените) се поддържа фиксирано (в илюстрацията $M=4$). Такова състояние е свързано със свойствата на различни материали. В [88], използвайки вероятностно-комбинаторен подход е представено липсващото решение на този 100-годишен проблем. Крайните резултати са дадени в термини на хипергеометричните функции на Гаус. Получените аналитични изрази позволяват не само дефинирането, но и определянето на една нова сила, предизвикана от флуктуациите във верижката, за която предложихме името сила на Хелмхолц. Точните резултати показват, че за периодични гранични условия, температурното и поведение е подобно на силата, появяваща се в някои версии на теорията за Големия взрив - силно отблъскване при високи температури, преход към умерено привличане за междинни стойности на температурата, и след това обратно към отблъскване, макар и много по-слабо, отколкото през първоначалния период на най-висока температура. Такъв тип сила може да се дефинира за произволен модел на статистическата механика и тя да бъде изследвана чрез различни аналитични и числени методи – например Монте Карло методи. За момента, освен за разгледания модел, такива резултати липсват. Публикация [88] бе избрана за най-значимо научно постижение на Института по Механика за 2023 година и влезе като такава в годишния отчет на БАН.

В [95] и [101, 103] е показано как резултатите от [88] могат да се получат на базата на метода на трансфер-матрици, използвайки за пръв път техника основана на полиномите на Чебишов от първи и втори род. Изведени са и точни резултати за антипериодични [95], Дирихле [101] гранични условия и за случай на дефект в системата. Изведени са и редица нови интегрални представяния на функциите на Гаус в термините на полиноми на Чебишов.

- 3) *Развитие на теорията на крайно-размерното подобие за системи с крайни размери (т.е. как един фазов преход се развива в система имаща поне един краен размер - тънки филми, напълно крайна система, и т.н.). Особено съществени са приносите за развитие на тази теория за системи с водещо или недоминиращо далекоедействие.*

Теоретичното описание на наблюдаваните свойства на системи с крайни размери се основава на **теорията на крайно-размерното подобие и нейните обобщения.**

Съвременното състояние на тази теория е отразено в монографията ми “The Theory of Critical Phenomena in Finite-Size Systems - Scaling and Quantum Effects” и в обзорите [92,94].

Развитието на теорията за системи с водещо далекодействие е представено в монографията, и в [5,13,16,24].

Случая на системи с недоминиращо далекодействие (например Ван дер Ваалс (ВДВ) тип взаимодействие, което е основното взаимодействие във всички неполярни флуиди) е разгледан в [18,19,20,21,26,28,29,33,42,50] в които е представено едно обобщение на теорията обхващащо този важен клас от системи. Формулиран е критерий за това колко голяма трябва да е дебелината на един филм (в зависимост от ВДВ параметрите на течността и ВДВ параметрите на ограждащите я повърхности) така, че крайноразмерното поведение на системата да е характерно за система с близкодействащо взаимодействие, към чийто универсалност клас системата с ВДВ принадлежи. Подобен критерий е формулиран и за влиянието на гравитацията [33] върху поведението на такива системи. Тези критерии са проверени за системи с дебелина до 8000 слоя, което води до необходимостта числено да се решат съответния брой взаимно свързани нелинейни уравнения. Точни резултати за поведението на корелационната функция в системи с ВДВ взаимодействие са представени в [19,21]. Там са представени и аргументи за общия случай (виж цитати 19.13 и 21.14).

Някои общи въпроси на теорията, които доведоха до нейното обобщение за системи с асимптотично голямо отместване на критичната им температура са разгледани в [22].

Квантови аспекти от дефиниране на теорията на крайноразмерното подобие са разгледани аналитично на базата на квантовия сферичен модел в [15-17].

4) Нов, *вероятностен* подход към теорията на крайноразмерното подобие е формулиран в [2,3].

- ❖ В [2] е показано, в термини на гранични Гибсови разпределения на подходящо нормирани случайни величини, че обобщените квази-средни на Боголюбов могат да се използват за анализ на поведението на системи претърпяващи фазов преход от първи род. Точни резултати са получени за сферичния модел.
- ❖ В [3] е показано как функциите характеризиращи крайно-размерното поведение на една система могат да се получат от граничните вероятностни разпределения на определени суми от подходящо нормирани случайни величини, като нормировката е двупараметрична и подбрана така, че системата с нарастването на размера си се приближава към критичната точка на безкрайната система. Конкретните пресмятания са направени на базата тип сферичен модел (със взаимодействие всички с всички). Предложено е обобщение, което се предполага валидно в общия случай.

5) *Получаване на нови точни решения за основни модели на статистическата механика като: едномерен ХУ и Хайзенберг модели в големия каноничен ансамбъл; едномерен модел на Изинг за система с фиксирана стойност на параметъра на подреждане (т.е., в каноничния ансамбъл), точно решение на модела за тримерен релативистичен Бозе газ, множество точни резултати за сферичния модел, точно решение за средно-полевия ХУ тримерен модел на тънък филм с “усукани” гранични условия, Гинзбург-Ландау средно-полеви модел, и други.*

Изследваните модели са от класа d -мерни $O(n)$ модели. Точни решения са получени за:

- ❖ *Едномерен модел на Изинг* ($d = 1, n = 1$)
 - С фиксирани гранични полета (голям каноничен ансамбъл) [49];
 - С фиксирана стойност на сумата на случайните величини, т.е., на параметъра на подреждане (каноничен ансамбъл) [88, 95, 101];
- ❖ Тримерен модел на *релятивистки Бозе газ* с геометрия на тънък филм [72];
- ❖ *Сферичен модел* (съответстващ на теоретичната граница $n \rightarrow \infty$) със свободни гранични условия [40,41]; резултати в рамките на полево-теоретична ренормализационно групова схема използвайки техниката на ε -разложението [20]. Конкретни нови резултати са изведени и за поведението на повърхностните фазови преходи в рамките на сферичния модел – виж работи [11,12]. Въпроса за съществуването на резонантни логаритмични корекции в поведението на модула на хеликоидалност и в свободната енергия на тримерни системи е разгледан в [6-9], като са получени редица нови конкретни аналитични резултати (някои от които и до днес очакват своето обяснение в рамките на една по-обща теория).
- ❖ *XU модел* ($n = 2$)
 - С фиксирани гранични полета при $d = 1$ (голям каноничен ансамбъл) [49];
 - При наложени „усукани“ гранични условия [36];
- ❖ *модел на Хайзенберг* с фиксирани гранични полета [49];
- ❖ *Монте Карло резултати* за *тримерния модел на Изинг*, *тримерния XU модел* и *тримерния модел на Хайзенберг* [23];
- ❖ *Гаусов модел* ($2 < d < 4$) [23,49];
 - С анизотропия [23,32];
 - С гранични условия от типа отместени по фаза бягащи вълни [49];
- ❖ Φ^4 *Гинзбург-Ландау средно-полеви модел* с външно поле. Математически проблемът се свежда до аналитичното решение на нелинейно-диференциално уравнение от втори род с полиномна нелинейност от 3-та степен при наличие на линеен член при различни гранични условия (ГУ): при тъй-наречените (+,+) ГУ [43, 44, 73]; при (+,-) ГУ [51, 64, 73]; при (Нойман,+) ГУ [53, 60]; (Нойман-Нойман) ГУ [61,73]; Дирихле ГУ [69,70,73,83]. Преди тези публикации за *някои* от тези гранични условия решения бяха известни *само* при нулево външно поле, което е съществен параметър влияещ силно върху поведението на величините характеризиращи системите.

6) Точно решение на Ψ -теорията на Гинзбург за тънък филм описващ ^4He .

Тази система е разгледана в [68]. Тя се описва с математически базиран на поведението на една комплексна функция, характеризирана с амплитуда и фаза, зависещи от координатите на течността. Постоянна фаза отговаря на неподвижен флуид, който случай разглеждаме. Математически задачата се свежда до решението на нелинейно диференциално уравнение от втори ред с наложени Дирихле гранични условия и нелинейна част представляваща полином от 6-та степен.

Полученото решение е за филми с крайна дебелина L . Освен силата на Казимир сме получили и профилите на параметъра на подреждане в зависимост от координатата z по протежение на дебелината на филма. Решението е изведено аналитично в термини на елиптични функции.

Получените в [68] свойства на силата на Казимир представляват към момента най-доброто съвпадение на теоретични аналитични резултати с експерименталните такива – виж фигури 3-5 в [68].

7) Изведено е обобщение на известното приближение на Дерягин, което обобщение дава точни резултати за взаимодействието на тяло с произволна форма с

такова ограничено от равнинна повърхност при условие, че потенциалът на взаимодействие е двучастичен.

Този резултат е получен в [38] и вече получи своето признание и от руската научна школа – виж цитати 38.22 и 38.24. В [38,66] методът е приложен за случаите на тор, елипсоид наклонен произволно спрямо равнинната повърхност, и други.

- 8) Математическо моделиране на поведението на статистико-механични модели с диполно взаимодействие – статии [1,4]. Разгледан е въпроса за основното състояние на двумерни системи от класически диполи, разположени върху двумерни ромбични решетки характеризирани с ъгъл на “ромбичност” α , както и въпроса за наличието на далечно подреждане и фазови преходи в такива системи. Понастоящем се оказва, че някои реални системи (от “квантови точки”) са близки до такава идеализирана постановка, което подхранва интереса към този тип моделни системи (виж цитат 1.65).
- 9) *Резултати получени с методите на математическото моделиране свързани с поведението на флуктуационно индуцирани сили – от основно значение за развитието на нанотехнологиите.*

Резултати получени в статии от група А.

- ❖ Резултатите за поведението на силата на Казимир са сумирани през 2023 г. в публикуван обширен обзор за точни резултати за критичния ефект на Казимир в Physics Reports (IF 30.51) – вижте [92]. Тази работа бе избрана за най-значимо научно постижение на Института по Механика за съответната година и влезе като такава в годишния отчет на БАН.
- ❖ В [88] през 2022 г. предложих (съвместно с Prof. Joseph Rudnick) дефиниция на *нова флуктуационно-индуцирана сила* - сила на Хелмхолтц. Бе получен точен резултат за тази сила в едномерния модел на Изинг с фиксирана стойност на сумата на случайните величини (параметъра на подреждане) при наложени периодични гранични условия. Тази работа бе избрана за най-значимо научно постижение на Института по Механика за 2022 година и влезе като такава в годишния отчет на БАН. В [95] тези резултати с използване на техниката на полиномите на Чебишов бе доразвита за антипериодични гранични условия, а в [101] – за Дирихле гранични условия.
- ❖ Точни резултати за силата на Казимир са получени за:
 - едномерен модел на Изинг при периодични, антипериодични и Дирихле гранични условия както при наличие на външно въздействащо поле, така и при фиксирана стойност на параметъра на подреждане (на сумата от случайните величини) [88,95,101];
 - двумерен модел на Изинг при периодични гранични условия;
- ❖ В [14] и [32] са получени аналитично единствените точно известни амплитуди на Казимир за тримерен нетривиален статистико-механичен модел.
- ❖ В [23] е предложен нов подход в теорията на статистико-механичния ефект на Казимир, основаващ се на аналог на оператора на напреженията за решетъчни системи. Подхода е приложен за изследване силата на Казимир в тримерен модел на Изинг (неполярни флуиди), ХУ модела (за свръхтечен хелий) и за модел на

Хайзенберг (описващ поведението на магнитни системи). Обзор на състоянието на изследванията в областта е представен в монографията ми.

- ❖ Квантови аспекти от силата на Казимир са изследвани аналитично в квантовия сферичен модел [15-17].
- ❖ Аналитични резултати за поведението на силата на Казимир са получени и за Φ^4 Гинзбург-Ландау средно-полеви модел с външно поле при различни гранични условия (ГУ): при тъй-наречените (+,+) ГУ [44, 73]; при (+,-) ГУ [64, 73]; при (Нойман,+) ГУ [53]; (Нойман-Нойман) ГУ [61,73]; Дирихле ГУ [73,83]. Преди тези публикации за *някои* от тези гранични условия решения бяха известни *само* при нулево външно поле, което е съществен параметър влияещ силно върху поведението на силата на Казимир.

Резултати получени в статии от група В.

Математическо моделиране на явления и сили от интерес за нанотехнологиите [27,30,31,34,35,37,74].

В частност това е моделиране и оценка на силите действащи на малки разстояния при микро и нано-асемблирането [27], върху силите действащи върху работните рамена на хващач (gripper) [30] действащ в неполярен флуид, върху влиянието на околната среда (температура) върху тези сили [31], за хващач с пиезоелектрична обратна връзка [34], върху взаимодействието на работното рамо на хващач с микро-обект намиращ се в неполярен флуид [35, 37], и накрая – върху ван дер Ваалс взаимодействието на въглеродна нано-тръбичка подложена на хидростатично налягане с равнинна повърхност [74].

II. Математическо моделиране на параметрите на човешкото тяло и движението на човека – публикации: [45-48], [54-59], [62,63,65], [71], [77-82], [84-86], [89-91], [93], [96-100].

На базата на 3D модели на сегментите на човешкото тяло, на комбинация от тези сегменти и на тялото като цяло, чрез методите на математическото моделиране на базата на собствени аналитични резултати, както и на разработени програми на базата на Mathematica и SolidWorks 3D CAD програмни пакети, са получени редица масово-инерционни характеристики

- за съответните сегменти [46,54,56,58,71,79,80,81];
- за тялото като едно цяло [45,55,59,62,63,86,89,90,91,93,96,98,99,100] избирайки положението на тялото да бъде във класифицирани и важни за биомеханиката позиции [47,48], включително и такива съгласно класификацията на НАСА [65,77,78,84,85] и разглеждани принципно важни за предсказване поведението на тялото в безтегловност. Любопитно сравненията на данните за средните български мъже с астронавтите на НАСА показват добра близост; за жени НАСА няма достатъчно данни поради липса на достатъчно на брой жени астронавтки.
- Изследване са и елементи от промяната на параметрите на тялото в зависимост от възрастта [93,96,97,100], пола [54],89, занимание или не със спорт [98,99].
- От особен интерес е моделиране не походката на човешкото тяло [57,82].

Част от тези резултати вече се използват за експертизи в криминалистиката (в България чрез договори с Прокуратурата на Института по Механика) за анализ на инциденти. Описаните по-горе изследвания са важни и за проблеми свързани с биомеханика на човешкото движение, ергономията, рехабилитацията, ортопедията и травматологията, спорта, производство на облекла, обувки и други. Редица други приложения са описани в цитиращите публикации.