

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

Л 641

P17-87-352

А.А.Литвин, В.Б.Приезжев

**ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ
ПРИБЛИЖЕНИЯ СВОБОДНЫХ ФЕРМИОНОВ**

1987

1. ВВЕДЕНИЕ

Случайные блуждания взаимодействующих частиц, решеточный газ с динамикой Кавасаки, решеточная модель бозонов с твердой сердцевиной образуют класс родственных моделей. В последнее время к этому классу были присоединены модели димеров на некоторых специальных решетках^{/1/} и модели полимеров биомембраны^{/2-4/}. Все перечисленные модели приводят к одной общей проблеме: как учесть влияние отталкивающего взаимодействия в одном узле на поведение системы частиц в целом? Известны два рецепта такого учета: приближение парного взаимодействия^{/5/} и "фермизация" модели, то есть замена симметричных собственных функций гамильтониана антисимметричными. Сравнение этих приближений и выяснение области их применимости стало особенно важным в связи с изучением фазового перехода в трехмерной модели полимеров.

Оба приближения в этой модели дают переход второго рода; однако в приближении парного взаимодействия теплоемкость в точке перехода имеет логарифмическую особенность^{/6,7/}, а приближение свободных фермионов приводит к простому скачку теплоемкости^{/3,8/}. Анализ, проведенный Изуямой^{/9/}, показал, что правильным является первый результат. Тип особенности определяет поведение системы при малых значениях плотности /которая в данной модели является параметром порядка/, а малая плотность обеспечивает применимость приближения парного взаимодействия. Напротив, при умеренной плотности предпочтительным оказывается приближение свободных фермионов, так как оно дает меньшую энергию основного состояния.

Если относительную точность двух приближений можно считать выясненной, то остается вопрос об абсолютной точности каждого из них. Цель данной работы - дать численную оценку точности приближения свободных фермионов при умеренной плотности частиц. Для этого нам потребуется модель, которая, с одной стороны, достаточно подробно изучена численными методами, а с другой стороны, имеет "фермионное" представление. Такой моделью оказывается задача о димерах на решетке алмаза. Энтропия плотной упаковки димеров на этой решетке вычислялась с помощью различных вариантов разложения в ряд и в настоящее время известна с точностью - 0,5%. Ниже будет показано, что эту модель

можно сформулировать как задачу о случайном блуждании совокупности частиц с двумя ограничениями: для каждой частицы запрещено одно направление движения; две частицы не могут попасть в один узел. Плотность частиц в этой задаче оказывается равной $3/4$. Приближение свободных фермионов дает значение энтропии, отличающееся от численного результата на 20%. Обсуждая причины низкой точности приближения, мы приходим к выводу о том, что основную ошибку вносит конкуренция между четными и нечетными перестановками в антисимметричных функциях. Устранение этой конкуренции путем замены исходной решетки на решетку Бете улучшает точность приближения до 8%.

2. ЭКВИВАЛЕНТНОСТЬ МОДЕЛЕЙ

Установим связь между моделями, перечисленными во введении. Рассмотрим сначала модель решеточного газа на квадратной решетке размером $N \times N$. В начальный момент времени n частиц находятся в узлах решетки, координаты которых задаются совокупностью векторов $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n\} = \Gamma$. Определим матрицу перехода A из состояния Γ в состояние Γ' за единицу времени:

$$A = \mathcal{P} h_n \cdot h_{n-1} \dots h_1 \mathcal{P}, \quad /1/$$

где

$$h_j = \sum_{|\vec{r}_j - \vec{r}'_j| = 1} |\vec{r}'_j\rangle \xi \langle \vec{r}_j| \quad /2/$$

сумма операторов, переводящих частицу с номером j из узла \vec{r}_j в один из четырех смежных узлов, ξ - статистический вес одного шага, а \mathcal{P} - проекционный оператор, запрещающий попадание двух частиц в один узел. Производящая функция для ансамбля n частиц, совершивших M шагов, определяется как сумма по всем начальным и конечным состояниям системы:

$$\Lambda_{MN}(n) = \frac{1}{n!} \sum_{\Gamma, \Gamma'} \langle \Gamma' | A^M | \Gamma \rangle \quad /3/$$

Как обычно, для получения Λ_{MN} в пределе $M \rightarrow \infty$ достаточно найти максимальное собственное значение W_0 матрицы перехода. Собственные функции Ψ_0 , соответствующие W_0 , являются также собственными функциями гамильтониана $H = -\ln A$, так что, вводя обозначение $\omega_0 = -\ln W_0$, можно написать

$$H \Psi_0 = \omega_0 \Psi_0, \quad /4/$$

и проблема вычисления $\Lambda_{MN}(n)$ сводится к определению энергии основного состояния гамильтониана H .

Для определения явного вида H введем оператор сдвига координат на единичный вектор решетки $\vec{\delta}$:

$$\vec{s}_j(\vec{\delta}) f(\vec{r}_j) = f(\vec{r}_j + \vec{\delta}), \quad /5/$$

и заметим, что сумма по всем четырем направлениям этого вектора

$$\sum_{|\vec{\delta}|=1} (s_j(\vec{\delta}) - 1) \equiv \Delta_j \quad /6/$$

совпадает с определением дискретного лапласиана. В этих обозначениях матрица перехода имеет вид

$$A = \mathcal{P} \prod_{j=1}^n (4 + \Delta_j) \mathcal{P}. \quad /7/$$

Полностью симметричная функция Ψ_0 может быть найдена среди бозонных состояний

$$\langle \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n | \chi(\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_n) \rangle = \frac{1}{N} \frac{1}{(n!)^{1/2}} \sum_{\mathcal{P}} P \exp(i \sum_{j=1}^n \vec{k}_j \vec{r}_j), \quad /8/$$

где P - оператор перестановки координат $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n$. Учитывая, что

$$\Delta_j e^{i\vec{k}\vec{r}_j} = (-4 + 2\cos k_x + 2\cos k_y) e^{i\vec{k}\vec{r}_j},$$

можно положить

$$W_0 = \langle \Psi_0 | \prod_{\vec{k}} (2\cos k_x + 2\cos k_y)^{\nu(\vec{k})} | \Psi_0 \rangle, \quad /9/$$

где k_x, k_y - компоненты вектора \vec{k} , а $\nu(\vec{k})$ - оператор чисел заполнения бозонных состояний, определяемый равенством

$$\nu(\vec{k}) | \chi(\{n\}) \rangle = n(\vec{k}) | \chi(\{n\}) \rangle. \quad /10/$$

Соответственно гамильтониан H может быть представлен в виде

$$H = -\mathcal{P} \sum_{\vec{k}} \ln |2(\cos k_x + \cos k_y)| a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} \mathcal{P}. \quad /11/$$

Так устанавливается связь между решеточным газом блуждающих частиц и моделью бозонов с твердой сердцевиной. Приближение свободных фермионов в этой задаче означает введение под знак суммы в правой части /8/ множителя $(-1)^P$, который равен 1 для четных перестановок и -1 для нечетных. При этом можно опустить проекционный оператор \mathcal{P} в выражениях /1/, /7/, /11/, так как условие запрета на попадание двух частиц в один узел выполняется теперь автоматически.

Модель полимеров биомембраны получается из модели решеточного газа, если считать дискретное время /или число шагов/

третьей пространственной координатой на решетке размером $N \times N \times M$. Тогда траектории частиц можно отождествить с направленными полимерами, которые не соприкасаются друг с другом ни в одной точке. Полимерные цепочки начинаются в узлах $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n$ в первом слое и заканчиваются в узлах $\vec{r}'_1, \dots, \vec{r}'_n$ последнего слоя. Статсумма модели полимеров Z_{MN} получается из $\Lambda_{MN}(\eta)$, если положить $\xi = e^{-\beta\mu}$, где μ - химический потенциал одного звена полимера, а β - обратная температура:

$$Z_{MN}(\xi) = \sum_n \Lambda_{MN}(\eta) \quad /12/$$

Ниже мы установим еще одну связь - между моделью димеров на решетке алмаза и моделью полимеров. Это дает возможность сравнить численное значение энтропии в первой модели с приближением свободных фермионов.

3. ДИМЕРЫ НА РИШЕТКЕ АЛМАЗА

Элементарная ячейка решетки алмаза изображена на рис.1. Для дальнейшего удобно деформировать эту решетку и совместить ее узлы с узлами кубической решетки, не нарушая при этом топологию исходной структуры. Результат такой деформации показан на рис.2а. На рис.2б изображена еще одна решетка с координатным числом 4, не эквивалентная решетке алмаза. Решетки на рис.2а,б представляют собой последовательность M параллельных двумерных решеток размером $N \times N$, имеющих гексагональную структуру. Решетка 2а отличается от 2б сдвигом на один шаг

в направлении одной из горизонтальных осей и имеет поэтому удвоенный период по вертикали.

Два узла решетки считаются смежными, если они соединены ребром /в решетках на рис.2а,б имеются соседние, но не смежные узлы/. Димерным покрытием называется разбиение множества узлов решетки на смежные пары. Обозначим через D_{MN} число димерных покрытий решетки размером $N \times N \times M$. Величина ϕ , определяемая равенством

$$D_{MN} = \phi^{\frac{MN^2}{2}}, \quad /13/$$

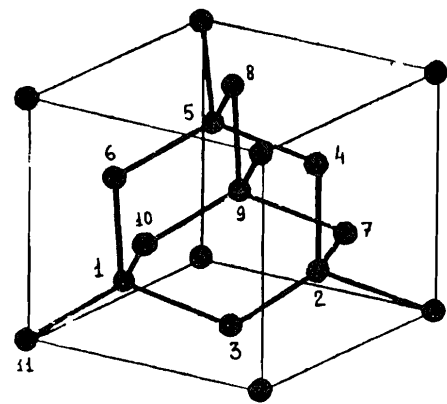


Рис. 1

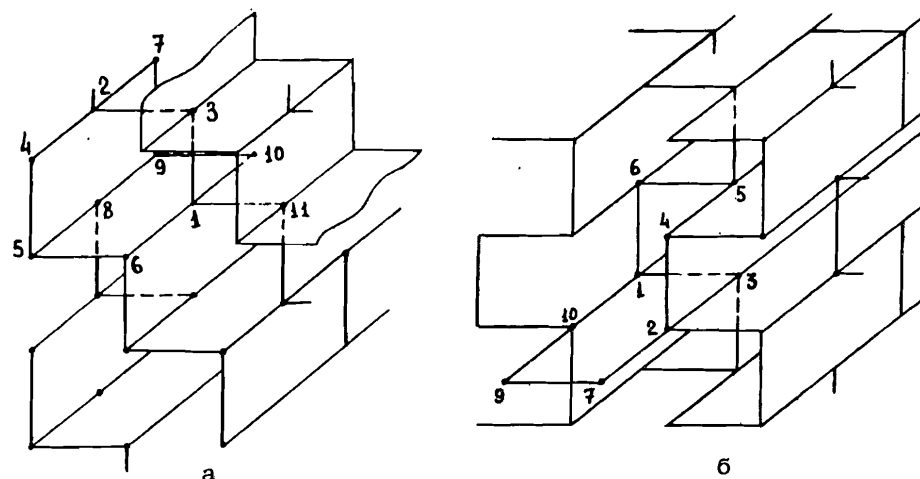


Рис. 2

называется молекулярной свободой и связана с удельной энтропией димерных покрытий s соотношением

$$s = \frac{1}{2} \ln \phi. \quad /14/$$

Припишем каждому горизонтальному димеру статистический вес ξ , а каждому вертикальному - единичный вес. Рассмотрим "основное" димерное покрытие, в котором все димеры вертикальны. Появление горизонтального димера в одной плоскости влечет за собой появление горизонтальных димеров во всех M плоскостях, причем димеры в соседних плоскостях обязательно соединены вертикальным ребром. Обозначим горизонтальный димер, находящийся в плоскости с номером i и содержащий узлы с двумерными координатами $(r_1^x, r_1^y) = \vec{r}_1$, $(r_2^x, r_2^y) = \vec{r}_2$ через $(\vec{r}_1, \vec{r}_2)_i$. Тогда димерное покрытие с одним горизонтальным димером в каждой плоскости может быть записано в виде

$$(\vec{r}_1, \vec{r}_2)_1 (\vec{r}_2, \vec{r}_3)_2 \dots (\vec{r}_{M-1}, \vec{r}_M)_M.$$

Из этого представления видно, что последовательность точек $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n$ можно считать случайным блужданием на двумерной решетке. В случае рис.2а блуждание происходит на квадратной решетке с двумя возможностями изменения первой координаты $r_i^x \rightarrow r_i^x \pm 1$ и единственным возможным изменением другой: $r_i^y \rightarrow r_i^y + 1$. В случае рис.2б получается простое случайное блуждание на гексагональной решетке.

Димерное покрытие с n горизонтальными димерами в каждой плоскости изображается в виде траекторий n блуждающих частиц. Из-за того, что различные димеры не имеют общих узлов, траек-

тории различных точек не пересекаются. Отсюда следует, что статистическая сумма димерных покрытий с n горизонтальными димерами совпадает с производящей функцией ансамбля n блуждающих частиц $\Lambda_{MN}(n)$, а для общего числа димерных покрытий справедливо равенство

$$D_{MN} = Z_{MN}(1), \quad /15/$$

и, следовательно,

$$s = \frac{1}{MN^2} \ln Z_{MN}(1). \quad /16/$$

Численное значение s для решетки алмаза известно с высокой точностью. Анализ перечисляющих рядов методом паде-аппроксимации дает $s = 2,658 \cdot 10^{-2}$. В следующем разделе мы найдем s в приближении свободных фермионов и, сравнивая результат с численным значением, определим точность этого приближения.

4. ПРИБЛИЖЕНИЕ СВОБОДНЫХ ФЕРМИОНОВ

Для проведения конкретных расчетов уточним граничные условия. Мы примем периодические граничные условия во всех трех направлениях и будем, таким образом, рассматривать замкнутые траектории блуждающих частиц. Основным фактом, вытекающим из приближения свободных фермионов, заключается в возможности выразить статистическую сумму через сумму по всем замкнутым путям, выходящим из точки трехмерной решетки i и возвращающимся в нее после t шагов ^{11/}:

$$\ln Z_{MN}(\xi) = - \sum_i \sum_{t=1}^{\infty} \frac{S_t(i) \xi^t}{t}. \quad /17/$$

В случае рис.2а все точки решетки эквивалентны и зависимость от i исчезает:

$$\ln Z_{MN}(\xi) = - \frac{MN^2}{2} \sum_{t=1}^{\infty} \frac{S_t(0) \xi^t}{t}, \quad /18/$$

где $S_t(0)$ - число всех замкнутых путей, начинающихся и заканчивающихся в начале координат. Коэффициент $1/2$ появился из-за того, что замкнутые пути могут проходить только через половину узлов в каждой плоскости.

Пусть $p_r(t)$ - путь из начала координат в точку \vec{r} с координатами (r_1, r_2, r_3) , содержащий t шагов. Определим сумму.

$$f(\vec{r}, t) = \sum_{p_r(t)} \xi^t. \quad /19/$$

Очевидно, что

$$S_t(0) \xi^t = f(0, t). \quad /20/$$

Функция $f(\vec{r}, t)$ удовлетворяет следующему рекуррентному соотношению:

$$f(r_1, r_2, r_3; t) = \xi f(r_1-1, r_2, r_3-1; t-1) + \xi f(r_1+1, r_2, r_3-1; t-1) + \xi f(r_1, r_2-1, r_3-1, t-1). \quad /21/$$

Решение этой системы получается с помощью фурье-преобразования

$$\tilde{f}(\vec{a}, t) = \sum_{r_1 r_2=1}^N \sum_{r_3=1}^M \exp\{-2\pi i (\frac{r_1 a_1}{N} + \frac{r_2 a_2}{N} + \frac{r_3 a_3}{M})\} f(\vec{r}, t), \quad /22/$$

которое дает

$$f(0, t) = \frac{1}{N^2 M} \sum_{a_1 a_2=1}^N \sum_{a_3=1}^M \lambda^t(a_1, a_2, a_3), \quad /23/$$

где

$$\lambda(a_1, a_2, a_3) = \xi \exp(\frac{2\pi i}{M} a_3) \{ 2 \cos(\frac{2\pi a_1}{N}) + \exp(\frac{2\pi i}{N} a_2) \}. \quad /24/$$

Подставляя /23/ в /20/, а /20/ в /18/ и учитывая равенство

$$- \sum_{t=1}^{\infty} \frac{\lambda^t}{t} = \ln(1 - \lambda),$$

получим

$$\ln Z_{MN} = \frac{1}{2} \sum_{a_1 a_2=1}^N \sum_{a_3=1}^M \ln[1 - \lambda(a_1, a_2, a_3)]. \quad /25/$$

Заменяя в последнем выражении суммирование интегрированием, получим с помощью /16/ окончательное выражение для энтропии:

$$s = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln[1 - e^{i\beta} (2 \cos \phi_1 + e^{i\phi_2})] d\phi_1 d\phi_2 d\beta. \quad /26/$$

Численное интегрирование в /26/ дает $s = 0,213$, что на 20% ниже ожидаемого результата.

Аналогичные расчеты для решетки рис.2б приводят к следующему выражению для энтропии:

$$s = \frac{1}{8} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \det | I - \gamma(e^{i\beta}) | d\phi_1 d\phi_2 d\beta, \quad /27/$$

где

$$\gamma(x) = \begin{bmatrix} 0 & x(1 + e^{i\phi_1}) & x e^{-i\phi_2} & 0 \\ x(1 + e^{-i\phi_1}) & 0 & 0 & x \\ x e^{i\phi_2} & 0 & 0 & x(1 + e^{i\phi_1}) \\ 0 & x & x(1 + e^{-i\phi_1}) & 0 \end{bmatrix} /28/$$

а I - единичная матрица. Расчеты в этом случае отличаются от предыдущих тем, что в элементарной ячейке гексагональной решетки находятся 4 узла и рекуррентное соотношение имеет матричный вид. Численное интегрирование в /27/ дает $s = 0,198$.

5. ОБОБЩЕННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ БЕТЕ

Выражение /17/ для статсуммы, как уже было замечено, является приближенным. В терминах случайных блужданий приближение состоит в том, что каждому замкнутому пути под знаком суммы в /17/ приписывается отрицательный знак. После этого можно не заботиться о проблеме взаимодействия между частицами: для каждой пары пересекающихся траекторий найдется одна самопересекающаяся, и все траектории, отвечающие столкновению частиц, сократятся. В результате такой процедуры в статсумме остаются только допустимые траектории n частиц $/n = 1, 2, \dots/$, входящие в нее со знаком $/-/^{n-1}$. Смысл приближения состоит в том, что полного сокращения положительных и отрицательных слагаемых не происходит, а остаток имеет асимптотический рост с тем же показателем, что и сама статсумма. Анализ, проведенный в предыдущих частях работы, показывает, что сокращение положительных и отрицательных вкладов происходит достаточно полно, чтобы изменить показатель роста остатка. Поэтому следует перестроить суммирование по траекториям так, чтобы все слагаемые в статсумме имели один и тот же знак. Добиться этого можно следующим образом.

Перейдем от блуждания по квадратной решетке с тремя возможными продолжениями пути /случай 2а/ к блужданию по решетке Бете с координационным числом три. В этом случае каждый замкнутый путь, содержащий nM шагов с $n > 1$, обязательно самопересекается. Подробное доказательство этого факта можно найти

в /12/. Теперь в статсумму входят траектории путей с равным числом шагов M , и простой заменой переменных вклад каждого пути может быть сделан положительным. Так, ценой нового приближения мы избавляемся от приближения свободных фермионов. Определим точность этого приближения /в работе /8/ оно было названо обобщенным приближением Бете/.

В работе /13/ показано, что блуждание на решетке Бете с координационным числом z эквивалентно одномерному блужданию с дополнительным весом каждого шага $\sqrt{z-1}$. Повторяя все выкладки п.4 для этого случая, получаем вместо /26/

$$s = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln(1 - 2\sqrt{z-1} e^{i\beta} \cos \phi) d\phi d\beta, \quad /29/$$

где мы положили $z = 3$. Вычисление интеграла в /29/ дает $s = 0,286$, что согласуется с ожидаемым результатом с точностью 8%.

Таким образом, мы приходим к выводу о том, что точность приближения свободных фермионов может быть увеличена за счет модификации задачи о случайном блуждании, которая либо уменьшает конкуренцию между положительными и отрицательными вкладами в статсумму, либо полностью устраняет ее.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kasteleyn P.W. - J.Math.Phys., 1964, 4, p.287.
2. Nagle J.F. - J.Chem.Phys., 1973, 58, No.1, p.252; Proc.Roy.Soc.Lond., 1974, A337, p.569.
3. Izuyama T., Akutsu Y. - J.Phys.Soc.Jpn., 1982, 51, No.1, p.50; - J.Phys.Soc.Jpn., 1982, 51, No.3, p.370.
4. Izuyama T.J. - Phys.Soc.Jpn., 1982, 51, No.11, p.3449.
5. Беляев С.Т. - ЖЭТФ, 1958, вып.1, с.279.
6. Bhattacharjee S.M. et al. - J.Stat.Phys., 1983, 32, p.361.
7. Fischer M.E. - J.Stat.Phys., 1984, 34, p.667.
8. Kornilov E.I., Priezzev V.B. - Z.Phys., 1984, B54, p.351.
9. Izuyama T. - Prog.Theor.,Phys.Suppl., 1984, 80, p.210.
10. Nagle J.F. - Phys.Rev., 1966, v.152, No.1, p.190.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика, М.: Наука, 1976, с.151.
12. Приезжев В.Б. - ТМФ, 1977, 31, № 1, с.89.
13. Hughes B.D., Sahimi M. - J.St.Phys., 1982, 29, No.4, p.773.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 мая 1987 года.