

Г - 129

17-80-387

ГАГУНАШВИЛИ
Николай Давидович

**ЭФФЕКТЫ ИСКЛЮЧЕННОГО ОБЪЕМА
В СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ПОЛИМЕРОВ**

Специальность 01.04.02 - теоретическая
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики
Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук В. Б. ПРИЕЗЖЕВ

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник Б. Н. ВАЛУЕВ
кандидат физико-математических наук П. М. БЛЕХЕР

Ведущая организация: Ленинградский государственный
университет.

Защита диссертации состоится "1" октября 1980 года
на заседании Специализированного совета К047.01.01 Лаборатории
теоретической физики Объединенного института ядерных исследова-
ний, г. Дубна, Московская область.

Автореферат разослан "21" августа 1980 года.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук

В. И. ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Простейшими моделями реальных систем многих тел являются решеточные модели. Этот класс моделей привлекает исследователей возможностью получать строгие результаты, имеющие большое значение при проверке физических гипотез и обосновании приближенных методов исследования реальных систем.

Полимер с "исключенным объемом" — это молекулярная цепь, различные участки которой не соприкасаются из-за действия сил отталкивания. В системе многих полимерных молекул с исключенным объемом силы отталкивания действуют также между различными молекулами.

Решеточная модель такой системы — модель мономеров (одноатомных молекул) и димеров (двухатомных молекул) была рассмотрена еще Фаулером и Рашбруком /1/. С тех пор эта модель исследовалась во многих работах, причем большая их часть посвящена двумерному случаю.

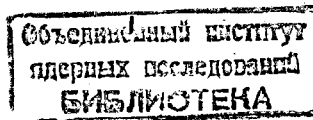
Крупный успех был достигнут Фишером и Кастеляйном /2,3/, которые вычислили точно статсумму чистой димерной задачи в двумерном случае. Метод пфаффiana, развитый здесь, нашел широкое применение в исследовании других моделей решеточной статистики (модель Изинга, модель свободных фермионов). Эти модели, как оказалось, могут быть сформулированы в виде димерных задач на некоторых декорированных решетках.

Значительный интерес представляют модели с полимерами большой длины и трехмерные модели. Этот класс задач мало изучен, и объясняется это прежде всего их комбинаторной сложностью.

В последнее время проявляется большой интерес к восьмивершинной модели (рис. I). В терминах этой модели формулируются все решеточные модели, для которых известны точные решения. Статсумма модели при значениях $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_8$, удовлетворяющих соотношениям

$$\omega_1 = \omega_2, \omega_3 = \omega_4, \omega_5 = \omega_6, \omega_7 = \omega_8;$$

вычислена Бакстером /4/. Другая область значений параметров, для которых известна статистическая сумма, соответствует условию "свободных фермионов": $\omega_1 \omega_2 + \omega_3 \omega_4 = \omega_5 \omega_6 + \omega_7 \omega_8$.



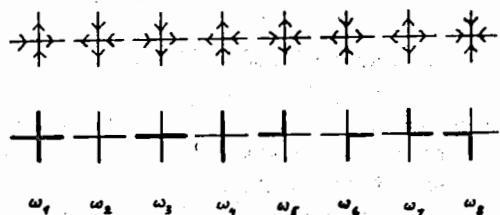


Рис.1. Конфигурации стрелок (линий), разрешенные в узлах 8-вершинной модели.

Представляется актуальным исследование восьмивершинной модели для значений параметров вне этих двух областей. Моделью такого типа является полимерная модель самоизбегающих путей /5/: $\omega_1 = 0, \omega_2 = 1, \omega_3 = x, \omega_4 = y, \omega_5 = \omega_6 = \omega_7 = \omega_8 = \sqrt{xy}$. Конфигурации этой модели представляют собой суперпозиции замкнутых самоизбегающих путей без пересечений различных путей друг с другом.

Цель работы – разработка методов решения задач, возникающих в полимерных моделях с исключенным объемом при больших длинах полимеров, а также в модели димеров на кубической решетке; разработка методов решения полимерной модели самоизбегающих путей.

Научная новизна и практическая ценность. В диссертации впервые получена строгая нижняя оценка молекулярной свободы линейных полимеров на квадратной решетке. Дана верхняя оценка молекулярной свободы линейных полимеров нечетной длины.

Впервые получены разложения в ряд статсуммы двухкомпонентной смеси линейных полимеров произвольной длины. Предложен метод исследования рядов, с помощью которого показано, что существует фазовый переход в смесях димер- r -мер. Проведено исследование функции плотности смеси димер- r -мер при различных r .

Получена нижняя оценка молекулярной свободы для димеров на кубической решетке.

Для модели самоизбегающих путей предложен метод определения критического значения активности x_c . Метод позволяет увеличивать точность определения значения x_c .

Разработан метод исследования модели самоизбегающих путей на треугольной решетке.

Результаты работы могут быть использованы в прикладных исследованиях полимерных и жидкокристаллических систем.

Структура диссертации. Работа состоит из 6 глав и заключения, содержит 87 страниц машинописного текста, 22 рисунка и 5 таблиц. Библиографический список состоит из 68 наименований.

Апробация работы. Результаты диссертации докладывались на школе по некоммутативной теории вероятностей в Казани в 1978 г., на семинаре по математической физике Вроцлав-Лейпциг в 1979 г., а также на семинарах ЛТФ ОИЯИ.

Публикации. По результатам диссертации опубликовано шесть статей.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В главе I дан обзор работ по решеточным моделям полимеров с исключенным объемом. Первые два параграфа посвящены работам по модели мономеров и димеров, третий параграф – по модели мономеров и тримеров и четвертый посвящен статистике самоизбегающих путей. Отмечены проблемы, возникающие при исследовании моделей полимеров с исключенным объемом. Указано, какие аспекты этих проблем исследуются в диссертации.

В главе 2 получены нижние оценки молекулярной свободы линейных полимеров на квадратной решетке и найдены верхние оценки молекулярной свободы полимеров нечетной длины.

Молекулярная свобода r -мера Φ_r – это характеристика плотного покрытия решетки r -мерами, она определяется так, что число различных покрытий решетки из rN узлов равно Φ_r^N . Способ получения оценок Φ_r в главе 2 основан на рассмотрении конфигураций r -меров на подрешетке с координатами узлов, кратными r . В /6/ показано, что если заданы положения r -меров на этой подрешетке, то оставшиеся узлы основной решетки можно покрыть r -мерами не более чем одним способом. Это свойство позволяет получить оценку

$$\Phi_r \leq (2r)^{1/r}$$

Полимер ориентирован относительно узла подрешетки, если можно указать направление, в котором находится большая часть полимера. Ориентированный полимер порождает отрезок пути между узлом подрешетки, на котором он расположен, и узлом подрешетки в направлении его ориентации.

В § 1 доказано, что не существует плотной упаковки Γ -меров, такой, что конфигурация ориентированных полимеров на сверхрешетке порождает замкнутый путь.

Подсчет конфигураций Γ -меров на сверхрешетке, не запрещенных этим условием, производится путем сопоставления рассматриваемой системы с точно решаемой циклической моделью [7], что дает верхнюю оценку для общего числа покрытий.

Для получения нижней оценки Φ_r в § 2 найдено множество конфигураций Γ -меров на подрешетке, которые заведомо могут быть дополнены до плотной упаковки. Конфигурации найденного множества удовлетворяют следующим условиям:

- 1) один из концов каждого Γ -мера из конфигурации лежит на некотором узле подрешетки;
- 2) конфигурация Γ -меров на подрешетке не порождает ни одного замкнутого пути.

Такое множество конфигураций Γ -меров на подрешетке изоморфно множеству димерных покрытий, число которых ограничивает общее число покрытий решетки Γ -мерами снизу.

В главе 3 получены ряды для основных термодинамических величин плотно упакованной смеси вертикальных Γ -меров и горизонтальных ℓ -меров. Статсумма представлена здесь в виде двойного ряда по степеням $\frac{x^\ell}{rx^\ell + ly^r}$ и $\frac{y^r}{rx^\ell + ly^r}$, где x и y -активности Γ -меров и ℓ -меров соответственно. Коэффициенты ряда получаются при помощи прямого перечисления замкнутых графов, расположенных на подрешетке. Исследование рядов для сжимаемости с помощью техники рациональной аппроксимации обнаружило существование фазового перехода в системах димер- Γ -мер при $2 < r \leq 18$ и его отсутствие в системах полимеров одинаковой длины r при $2 \leq r \leq 7$. Исследование теми же методами рядов для плотности r - ℓ смесей показало, что при $\ell \rightarrow \infty$ плотность асимптотически приближается к функции

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq x \leq q_r, \\ 1 & \text{при } x > q_r, \end{cases} \text{ где } q_r - \text{константа (рис. 2).}$$

В главе 4 найдена нижняя оценка молекулярной свободы димеров на кубической решетке. Наилучшая оценка для Φ_2 , полученная в [8], имеет вид

$$\Phi_2 \geq \exp \left\{ \frac{1}{2x} \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^\pi d\theta_3 \ln \left[4 \sum_{i=1}^3 \sin^2 \theta_i \right] \right\} = 2.308721 \dots \quad (1)$$

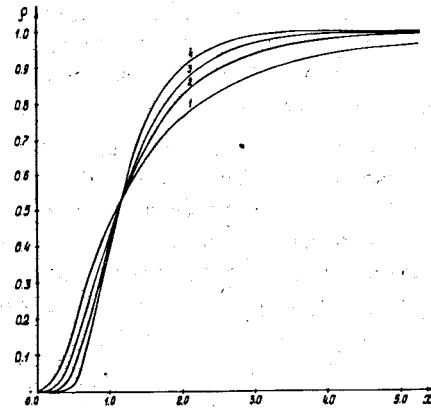


Рис. 2. Зависимость плотности от активности в смесях:

- (1) - димеров и 3-меров;
- (2) - димеров и 4-меров;
- (3) - димеров и 5-меров;
- (4) - димеров и 6-меров.

В [9] было показано, что выражение (1) является точным значением Φ_2 для модели димеров на кубической решетке со следующим свойством покрытий: димеры покрытия не порождают замкнутые пути на подрешетках с четными и нечетными координатами узлов. Улучшение оценки (1), предложенное в главе 4, основано на том, что учитывается вклад в Φ_2 от некоторого множества конфигураций димеров, порождающих замкнутые пути на одной из подрешеток.

В главе 5 предложен метод решения модели самоизбегающих путей на квадратной решетке [5]. Было показано [5], что эта задача может быть решена точно, если рассматривать ее на решетке специального вида, а именно, на решетке с двумя возможностями прохождения узлов в вертикальном направлении. В § 2 найдено выражение статсуммы исходной задачи $Z(x)$ через статсумму вспомогательной модели:

$$Z(x) = Z^*(x) \left(1 - \frac{1}{2 \cdot 2!} \sum \langle i_1 \rangle_x + \dots + (-1)^n \frac{1}{2^n n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \langle i_1, \dots, i_n \rangle_x \right), \quad (2)$$

где $\langle i_1, \dots, i_k \rangle_x$ - коррелятор вертикальных участков пути в точках i_1, \dots, i_k . На основании этого представления предложен метод решения задачи, который позволяет последовательно увеличивать точность определения критических параметров модели. В первом приближении найдено критическое значение активности x_c .

В главе 6 исследуется модель самоизбегающих путей на треугольной решетке. Показано, что задача может быть решена точно, если вместо планарной решетки рассматривать решетку с определенным образом введенными топологическими дефектами. Эта модель, названная здесь вспомогательной, решается методом пфаффиана, путем сведения ее к димерной проблеме. На рис.3 показаны примеры соответствия.

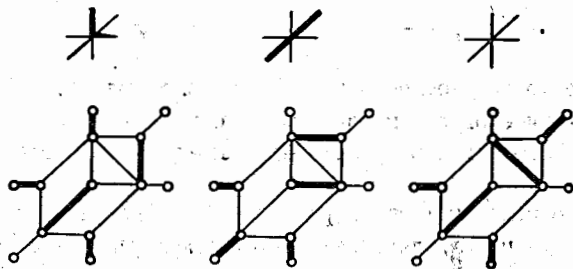


Рис.3. Конфигурации линий в узлах модели самоизбегающих путей и соответствующие им размещения димеров на декорированной решетке.

Затем производится учет влияния дефектов и приводится явное выражение для статсуммы модели на планарной решетке. Вычисляются приближенно критическое значение активности.

В заключении приведены основные результаты диссертации, которые представляются к защите:

1. Получена нижняя оценка молекулярной свободы линейных полимеров на квадратной решетке, которая имеет вид

$$\Phi_r \geq \exp\{4G/\pi r\} \quad (G = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n-1} \frac{1}{(2n+1)^2}).$$

2. Получена новая верхняя оценка молекулярной свободы линейных полимеров нечетной длины на квадратной решетке

$$\Phi_r \leq \left(\frac{r-1}{2}\right)^{1/r} \exp\left\{\frac{1}{\pi r} \int_0^{\pi} \operatorname{arsh}\left(\frac{2r}{r-1} - \cos\varphi\right) d\varphi\right\}.$$

3. Получено разложение в ряд статсуммы смеси горизонтальных линейных ℓ -меров и вертикальных линейных r -меров. С помощью техники рациональной аппроксимации обнаружено существование фазового перехода в системах димер- r -мер при $2 < r \leq 18$ и его отсутствие в системах полимеров одинаковой длины r при $2 \leq r \leq 7$. Теми же методами показано, что при $\ell \rightarrow \infty$ плотность $\rho(x)$ асимптотически приближается к функции

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq x \leq q_r, \\ 1 & \text{при } x > q_r, \end{cases} \text{ где } q_r - \text{константа.}$$

4. Получена новая нижняя оценка для молекулярной свободы димеров на кубической решетке

$$\Phi_2 \geq 2,309755.$$

5. Предложен метод решения модели самоизбегающих путей на квадратной решетке, позволяющий увеличивать точность определения значения критической точки модели. В первом приближении найдена критическая точка.

6. Предложен аналитический метод решения модели самоизбегающих путей на треугольной решетке. Найдена приближенно критическая точка модели.

Л и т е р а т у р а

1. Fowler R.H., Rushbrooke G.S. Statistical theory of perfect solution. Trans. Faraday Soc., 1937, v.33, pt.10, pp.1272-1294.
2. Fisher M.E. Statistical mechanics of dimers on a plane lattice. Phys.Rev., 1961, v.124, No. 6, pp.1664-1672.
3. Kasteleyn P.W. The statistics of dimers on a lattice. I. The number of dimer arrangements on a quadratic lattice. Physica, 1961, d. 27, No. 12, pp.1209-1225.
4. Baxter R.J. Partition function of the eight-vertex lattice model. Ann. of Phys., 1972, vol. 70, No. 1, pp.193-228.
5. Приезжев В.Б. Двумерная модель полимеров с исключенным объемом. ЖЭТФ, 1978, т.74, вып.3, с.1177-1183.
6. Ковальский Я., Приезжев В.Б. Молекулярная свобода прямолинейных полимеров на квадратной решетке. Дубна, 1978. 10 с. (Сообщение/ОИЯИ, Р17-11171).

7. Приезжев В.Б. Комбинаторные аспекты задачи о димерах. ТМФ, 1977, т:31, № I, с.89-100.
8. Hammersley J.M. An improved lower bound for the multidimensional dimer problem. Proc. Cambridge Phil. Soc., 1968, vol. 64, pt. 2, pp.455-463.
9. Приезжев В.Б. Статистика димеров на кубической решетке. I. Точнорешаемая модель. Дубна, 1980. 16 с. (Сообщение/ ОИЯИ, Р17-80-185).

Результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Гагунашвили Н.Д., Приезжев В.Б. Самоизбегающие пути на треугольной решетке. ТМФ, 1978, т.35, № 3, с.332-338.
2. Гагунашвили Н.Д., Приезжев В.Б. Метод моментов в теории случайных блужданий без самопересечений. Дубна, 1978. II с. (Сообщение/ОИЯИ, Р17-11367).
3. Гагунашвили Н.Д., Приезжев В.Б. О плотной упаковке прямолинейных полимеров на квадратной решетке. ТМФ, 1979, т.39, № 3, с.347-352.
4. Гагунашвили Н.Д., Приезжев В.Б. Термодинамика смеси молекул, адсорбированных на поверхности кристаллической решетки. Дубна, 1979. 12 с. (Препринт/ ОИЯИ, Р17-12625).
5. Гагунашвили Н.Д., Клеминьски С., Приезжев В.Б. О статистической сумме 8-вершинной модели. Дубна, 1979. II с. (Сообщение/ ОИЯИ, Р17-12924).
6. Гагунашвили Н.Д., Приезжев В.Б. Статистика димеров на кубической решетке. II. Улучшенная нижняя оценка. Дубна, 1980. 10 с. (Сообщение/ОИЯИ, Р17-80-86).

Рукопись поступила в издательский отдел
9 июня 1980 года.