ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-91-530

ЛИТВИН
Александр Анатольевич

УДК 531.19

ГРАНИЧНЫЕ ЭФФЕКТЫ В РЕШЕТОЧНЫХ МОДЕЛЯХ, РЕШАЕМЫХ МЕТОДОМ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ

Специальность: 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1991

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник В.Б.ПРИЕЗЖЕВ

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник В.И.АЛХИМОВ

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник В.Н.ПЛЕЧКО

Ведущая организация:
физический факультет Киевского государственного университета

Автореферат разослан "___"____________199 г.
Защита диссертации состоится "___"____________199 г.
в ____ час. на заседании Специализированного совета К047.01.01.Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований , г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь совета
кандидат физико-математических наук А.Е.ДОРОХОВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Решеточные модели в статистической физике играют важнейшую роль в понимании поведения сложных реальных систем. Важный класс таких моделей образуют решеточные модели полимеров. Если под полимером понимать произвольную связную линию, проведенную по ребрам решетки, то любая классическая решеточная модель подходящим подбором химических потенциалов может быть сведена к системе полимеров на той же решетке. В этом смысле язык полимерных конфигураций является более общим, имеет самостоятельное значение и, естественно, требует общего подхода к проблеме перечисления конфигураций моделей. Такой подход формируется на стыке теории графов /1,2/ и теории случайных блужданий на решетках /3/. Хорошим примером реализации такого подхода является решение Н.В.Вдовиченко задачи Изинга /4/.

Простейшей математической моделью реального полимера является случайное блуждание без самопересечений, отражающее конфигурационные свойства полимера и учитывающее влияние короткодействующих сил отталкивания. Решетка моделирует исключенный объем в отличие от континуальных моделей, в которых невозможно корректно ввести предел плотной упаковки.

Актуальность темы диссертации определяется применением единого подхода к проблеме перечисления конфигураций различных решеточных моделей и выявлению их новых свойств.

Цель работы состоит в применении метода случайных блужданий для решения модели биомембраны Изуямы и Акутсу (ИА-модель) /5/ с границей в приближении свободных фермионов, а также в вычислении парного потенциала косвенного взаимодействия в системе липидных цепей; в выводе уравнений анзаца Бете шести-вершинной модели для произвольно ориентированных периодических граничных условий; в изучении энтропийного вклада в термодинамику расплавленных абрикосовских вихрей в ВТСП в рамках предложенных моделей.

Научная новизна. Впервые решена модель длинных полимеров (ИА-модель) с границей в приближении свободных фермионов. Обнаружено существование вблизи границы обогащенного слоя и изменение критических свойств системы в зависимости от расстояния до границы. В рамках модели впервые вычислен потенциал косвенного взаимодействия двух жестких тонких стержней в системе полимеров конечной длины. Впервые получены уравнения анзаца Бете шести-вершинной модели с произвольно ориентированными периодическими граничными условиями. В отличие от примененной техники случайных блужданий, традиционный метод трансфер-матрицы не позволяет справиться с такой задачей из-за необозримой сложности самой трансфер-матрицы. Предложены решеточные модели для описания энтропийного вклада в термодинамику расплавленных абрикосовских вихрей в ВТСП. В рамках модели показана несущественная роль перепутывания вихрей, а также предложен эксперимент, позволяющий выявить, что лучше моделирует гибкие вихревые линии: бозоны или фермионы.

Следующие результаты выносятся для защиты:

1. В приближении свободных фермионов решена ИА-модель с границей. Обнаружено существование обогащенного слоя вблизи границы. Обнаружен кроссовер-эффект: при малых отклонениях τ от критической температуры плотность полимеров ведет себя как τ^2 вблизи границы и как τ в глубине образца.

2. В рамках ИА-модели вычислен потенциал косвенного взаимодействия двух тонких жестких стержней в системе липидных цепей конечной длины N. Обнаружено, что начиная с $N\approx10$ потенциал выходит на насыщение, отсюда сделан вывод о реалистичности приближения $N=\infty$ для описания биомембран, у которых $N\sim20$. Показано изменение рельефа потенциала в зависимости от плотности полимеров.

3. На примере модели димеров на решетке алмаза впервые оценена абсолютная точность приближения свободных фермионов при умеренных плотностях. Значение энтропии в этом приближении ниже ожидаемого на 20%. Обобщенное приближение Бете дает энтропию на 8% выше ожидаемой.

4. Впервые получены уравнения анзаца Бете шести-вершинной модели на решетке, повернутой на произвольный угол.

5. Предложены решеточные модели для учета энтропийного вклада в термодинамику расплавленных абрикосовских вихрей в ВТСП. В рамках модели показана несущественная роль перепутывания вихрей. Предложен эксперимент для сравнения бозонного и фермионного подходов к моделированию вихревых линий.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на Всесоюзной конференции по физике полимеров (Черноголовка, 1988), на Международной конференции по вычислительным методам в биомеханике (г. Альбена, Болгария), на семинарах: мех-мат МГУ, Карлов университет, г. Прага, в Лабораториях теоретической и нейтронной физики ОИЯИ (Дубна).

Публикации. По результатам диссертационной работы опубликовано шесть печатных работ (список прилагается).

Объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы, состоящего из 60 названий. Общий объем диссертации – 106 страниц машинописного текста, включая 18 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обсуждаются модели полимеров и различные подходы к их решению, дано краткое изложение материала диссертации.

Первая глава посвящена исследованию модели ИА биомембраны.

В §1 в приближении свободных фермионов решается ИА-модель с границей. Логарифм статистической суммы в этом приближении имеет вид:

$$\ln \Lambda(x) = -N \sum_{r} \sum_{K} \frac{S_K(r)x^K}{K}, \qquad (1)$$

где N – вертикальный размер решетки, $r=(l_1,l_2)$ – координата блуждающей точки, x – активность полимерного звена (шага блуждающей точки) ; $S_K(x)$ – число всех замкнутых путей в полупространстве с длиной $K=kN$, $k=1,2,\dots$. Выражая сумму (1) через производящую функцию случайных блужданий и, далее, решая задачу о простом случайном блуждании одной частицы на полуплоскости, мы приходим к выражению для плотности полимеров на границе:

$$\rho_0(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint\limits_{|\cos\phi_1+\cos\phi_2|>1/2x} \Big[1 - \cos(2\phi_1)\Big] d\phi_1 d\phi_2 . \qquad (2)$$

Учитывая, что плотность полимеров на трансляционно инвариантной решетке имеет вид первого слагаемого выражения (2), мы получаем, что, начиная с плотностей $\rho \approx 0.6$ приграничный слой становится избыточным, т.е. $\rho_0 > \rho$. Другой эффект, следующий из решения, состоит в изменении рода фазового перехода от стенки вглубь образца: $\rho_0 \sim \tau^2$, $\rho \sim \tau$, где $\tau = x - x_c$, $x_c = 1/4$ – критическая точка модели.

В §2 решается задача о косвенном взаимодействии двух тонких жестких стержней в рамках ИА-модели. Потенциал взаимодействия двух стержней можно записать в виде:

$$V_N(r_1, r_2) = F_N(y,y) - F_N(1,y) - F_N(y,1) + F_N(1,1) , \qquad (3)$$

где r_1 и r_2 – координаты стержней, N – длина полимерных цепей, F_N – свободная энергия решетки, y – константа взаимодействия полимера со стержнем, единица означает, что в точке r_1 или r_2 стержень отсутствует. Свободная энергия выражается через логарифм статсуммы (1), и задача опять сводится к вычислению производящей функции свободного блуждания по решетке с примесями в точках r_1 и r_2. В случае бесконечно большого отталкивания полимера от стержня ($y=0$) выражение для потенциала имеет особенно простой вид:

$$V_N(R) = \sum_{j=1}^{N} \ln|1 - F^2(R)| , \qquad (4)$$

где $F(R) = G(R)/G(0)$, $G(R)$ – производящая функция свободного блуждания по трансляционно инвариантной решетке с весом $\xi_j = x \exp(2\pi i j/N + i\pi/N)$, x – активность полимерного звена.

В §3 дается численная оценка приближения свободных фермионов для модели димеров на решетке алмаза. Энтропия на один узел отличается от ожидаемого результата на 20%.

<u>Вторая глава</u> полностью посвящена выводу уравнений анзаца Бете шести-вершинной модели с произвольно ориентированными периодическими граничными условиями. В §1 решается задача о случайном блуждании одной частицы на повернутой решетке. В §2 формулируются условия сокращения конфигураций случайных путей, которые не удовлетворяют правилу льда. Эти условия вместе с периодическими граничными условиями и приводят к уравнениям анзаца Бете на повернутой решетке. В случае модели льда уравнения имеют вид:

$$\exp(ik_j L_x) = \prod_{j=1}^{n} B(k_j, k_i) , \qquad (5)$$

$$B(p,q) = -\frac{1 + e^{i(p+q)(a_1+a_2)}(\lambda_p\lambda_q)^{a_2-a_1} + e^{iq(a_1+a_2)}\lambda_q^{a_2-a_1}}{1 + e^{i(p+q)(a_1+a_2)}(\lambda_p\lambda_q)^{a_2-a_1} + e^{ip(a_1+a_2)}\lambda_p^{a_2-a_1}} , \qquad (6)$$

где k_j – волновое число j-ой блуждающей точки, L_x – горизонтальный размер вспомогательной решетки, ориентированной нормально, на которой построена основная решетка с образующими ортогональными векторами (a_1, a_2) и $(a_2, -a_1)$, a_1 и a_2 – целые числа ; λ_k – максимальный по модулю корень уравнения

$$\lambda_k^{a_2} e^{ika_1} - \lambda_k^{a_2-a_1} e^{ik(a_1+a_2)} - 1 = 0 . \qquad (7)$$

В §3 показано, что решение (5)-(7) воспроизводит известное решение Либа /6/ для нормальной ориентации, которое получается в пределе $a_2 \to \infty$ $a_1 = 1$, и решение Пега /7/ для решетки, повернутой на угол $\pi/4$, что соответствует случаю $a_1 = a_2 = 1$.

В третьей главе предложены двумерная и трехмерная модели для учета энтропийного вклада в термодинамические свойства фазы расплавленных абрикосовских вихрей в ВТСП. Эти модели аналогичны моделям полимеров, рассмотренных в первой главе диссертации. Только теперь активность единицы длины вихря связана с параметрами сверхпроводника: $x=1/2\exp(\mu/k_bT)$, $\mu=H\Phi_0/4\pi-\varepsilon_1$, $\varepsilon_1=H_{c1}\Phi_0/4\pi$. Здесь H - внешнее магнитное поле, Φ_0 - квант магнитного потока, ε_1 - энергия натяжения вихря, H_{c1} - первое критическое поле. Выражение для логарифма статсуммы модели размерности d с толщиной образца L получается в следующем виде:

$$\ln Z^d(x) = \frac{1}{L(2\pi)^{d-1}} \int_0^{2\pi}\!\!\dots\!\int d^{d-1}\phi \, \ln\left|1 + (x\lambda_{d-1}(\phi))^L\right|, \quad (8)$$

где $\lambda_1(\phi)=2\cos\phi_1$, $\lambda_2(\phi)=e^{i\phi_1}+e^{i\phi_2}+e^{i\phi_1+i\phi_2}$. Кривые изотермической восприимчивости, вычисленной по формуле $K=x\partial/\partial x\rho(x)$, имеют слабо выраженный пик, положение которого ρ_{max} и толщина образца L связаны соотношением

$$\rho_{max} \sim cL^{-\alpha} \quad (9)$$

для обеих размерностей. В случае d=3 имеем $c_3=0.59$, $\alpha_3=0.44$; для d=2: $c_2=0.70$ и $\alpha_3=0.46$. Поскольку в двумерной модели перепутывание вихрей невозможно, мы делаем вывод о том, что если пик и связан со сменой режимов при увеличении L, то это следствие простого отталкивания вихрей друг от друга, а не их перепутывания. Из работы Нельсона /8/, в которой предложена двумерная модель бозонов для описания изогнутых вихрей, следует, что смена режимов происходит при $\rho_{kp}\sim L^{-1}$. Отсюда возникает принципиальная возможность сравнить экспериментально бозонную и фермионную модели, поскольку $\alpha_3^B=1$, $\alpha_3^F\cong 1/2$.

В заключении даны основные результаты, выносимые на защиту.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. А.А.Литвин, В.Б.Приезжев. - Исследование граничного слоя в модели полимеров биомембраны. - Сообщение ОИЯИ, Р17-87-4, Дубна, 1987.
2. А.А.Литвин, В.Б.Приезжев. - Численный анализ приближения свободных фермионов. - Сообщение ОИЯИ, Р17-87-352, Дубна, 1987.
3. A.A.Litvin, V.B.Priezzhev. - Indirect interaction in a system of polymer chains. - Physica A, 1990, vol.163, p.468-482.
4. A.A.Litvin, V.B.Priezzhev. - The Bethe ansatz for the six-vertex model with rotated boundery conditions. - J.Stat. Phys., 1990, vol.60(3/4), p.307-325.
5. E.I.Kornilov, A.A.Litvin, V.B.Priezzhev. - Thermodynamics of melted flux liquids.- Materials Science Forum, 1990, Vols.62-64, p.197-198.
6. E.I.Kornilov, A.A.Litvin. - On the entropy contribution to thermodinamics of melted flux liquids. - Z.Phys.B - Condensed Matter,1991, vol.84, p.3-8.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kasteleyn P.W. - Graph theory and cristal physics. - In: Graph Theory and Theoretical Physycs, edited by F.Harary, Academic Press, Inc., London and New York, 1967, chap.2, pp.30-45.
2. Харари Ф., Палмер Э. - Перечисление графов, М.,1977.
3. Montroll E.W. - Lattice statistics. - In: Aplied Combinatorial Mathematics, edited by E.F.Beckenbach, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1964, chap.4, p.96-143.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. - Статистическая физика, М., 1964, с.527-535.

5. Izuyama T., Akutsu Y. - Statistical mechanics of biomembrane phase transition. - J.Phys. Soc. Jpn., 1982, vol.51, N1, p.50-58.
6. Lieb E.H. - Exact solution of the problem of the entropy of two-dimensional ice. - Phys.Rev.Lett., 1967, vol.18, p.692-694.
7. Pegg N.E. - A new derivatin of the partition function of the six-vertex model. - Ann.Israel Phys. Soc., 1974, vol. 27, p.637-640.
8. Nelson D.R.,Seung S.H. - Theory of melted flux liquids. - Phys.Rev.B , 1989, vol.39, p.9153-9174.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 декабря 1991 года.