

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



*29/iii-77*

P17 - 10666

Г-129

*3362 / 2-77*

Н.Д.Гагунашвили, В.Б.Приезжев

САМОИЗБЕГАЮЩИЕ ПУТИ  
НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

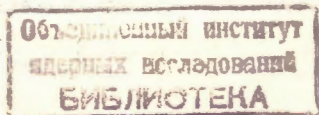
**1977**

P17 - 10666

Н.Д.Гагунашвили, В.Б.Приезжев

САМОИЗБЕГАЮЩИЕ ПУТИ  
НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

*Направлено в ТМФ*



Гагунашвили Н.Д., Приезжев В.Б.

P17 - 10666

Самонизбегающие пути на треугольной решетке

Предложен аналитический метод расчёта статистической суммы для самонизбегающих путей на треугольной решетке. Показано, что теплоемкость системы имеет логарифмическую особенность в критической точке. Вычислено значение критической температуры, которое находится в процентном согласии с результатами высокотемпературных разложений.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Gagunashvili N.D., Prieszhev V.B.

P17 - 10666

Self-Avoiding Walks on the Triangular Lattice

The analytical method of calculation of the partition function for self-avoiding walks on the triangular lattice is proposed. The specific heat of the system is shown to have the logarithmic singularity at the critical point. The agreement between the calculated value of the critical temperature and the results of high-temperature expansion is of the order of 1%.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

Случайный замкнутый путь без самопересечений является математической моделью длинной макромолекулы, различные участки которой не соприкасаются из-за действия сил отталкивания. В двухмерном случае состояние системы макромолекул в этой модели определяется конфигурацией непересекающихся и не соприкасающихся многоугольников. Обычно рассматривается задача о перечислении всех возможных конфигураций на решетке определенного вида<sup>/1-5/</sup>. В этом случае многоугольники образуются ребрами решетки, каждое из которых является единичным шагом случайного пути. Тогда задача сводится к вычислению производящей функции числа конфигураций многоугольников:

$$Z(x) = \sum_n d(n)x^n, \quad /1/$$

где  $d(n)$  - число конфигураций с периметром  $n$  на данной решетке. Если придать аргументу  $x$  статистический

смысл /например, положить  $x = \exp(-\frac{J}{kT})$ , где  $J$  -

энергия единичного участка пути,  $T$  - температура,  $k$  - постоянная Больцмана/, то можно видеть, что  $Z(x)$  превращается в статсумму изучаемой системы.

Имеется очевидная аналогия между описываемой моделью и графическим представлением плоской модели Изинга, поэтому естественно ожидать, что, подобно последней, система непересекающихся многоугольников обладает критическим поведением при некотором значе-

нии  $x_c$ . Доказательство существования фазового перехода в модели самоизбегающих путей, а также нахождение точного значения  $x_c$  является одной из нерешенных задач статистической физики. Попытка аналитического определения критического значения  $x$  привела Темперли<sup>/1/</sup> к предположению о равенстве  $x_c$  в рассматриваемой модели и в модели Изинга. Позднее приближенные значения  $x_c$  для различных типов решеток были определены методом Монте-Карло<sup>/3/</sup>, а также с помощью техники высокотемпературных разложений<sup>/4.5/</sup>. Результаты этих работ не подтвердили предположения Темперли. Так, например, в модели Изинга для квадратной решетки  $x_c^{-1} = 1 + \sqrt{2} \approx 2,414$ , в то время как последние расчеты  $x_c^{-1}$  в системе самоизбегающих путей с помощью разложения в ряд дают значение  $x_c^{-1} = 2,6385 \pm 0,001$ <sup>/4/</sup>.

В работе одного из авторов<sup>/6/</sup> было показано, что задача о перечислении самоизбегающих путей может быть решена точно, если вместо планарной решетки рассматривать решетку с определенным образом введенными топологическими дефектами. Решение последней задачи дает метод решения исходной, состоящий в выяснении связи между статистическими суммами задачи о самоизбегающих путях на решетке с дефектами и без них.

В настоящей работе предлагается аналитический метод расчета, производящий функции /1/ самоизбегающих замкнутых путей на треугольной решетке. В нем учет влияния введенных дефектов производится в приближении, которое может быть названо усреднением вдоль траекторий случайного блуждания. Метод позволяет получить явное выражение для статсуммы системы замкнутых многоугольников на треугольной решетке и вычислить ее термодинамические характеристики.

Показано, что теплоемкость системы имеет логарифмическую особенность при  $x = x_c$ . Вычисленное значение  $x_c$  с точностью до 1% совпадает с результатом высокотемпературных разложений.

## 1. ОСНОВНАЯ И ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ МОДЕЛИ

Рассмотрим треугольную решетку  $T$  /рис. 1/, имеющую  $N$  узлов по горизонтали,  $M$  по вертикали и свернутую в тор для создания периодических граничных условий.

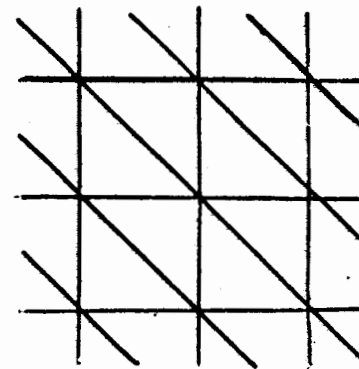


Рис. 1

Подмножество ребер  $R$  назовем конфигурацией замкнутых многоугольников, если в каждом узле имеется либо два, либо нет ни одного ребра из  $R$ . Множество всех конфигураций на данной решетке обозначим через  $\mathcal{R}$ . Производящую функцию на решетке /1/ можно записать в виде

$$Z(x) = \sum_{R \in \mathcal{R}} x^{|R|},$$

где  $|R|$  - число ребер в конфигурации  $R$ .

Попытаемся свести данную задачу к задаче о перечислении покрытий решетки димерами<sup>/7,8/</sup>. Димером называется помеченное ребро вместе со своими вершинами/. Покрытие решетки димерами есть такое их расположение, при котором все узлы принадлежат одному и только одному димеру. Необходимо найти решетку, для которой существовало бы соответствие между димерными покрытиями и конфигурациями многоугольников на решетке  $T$ . Четыре элементарных ячейки решетки

D, удовлетворяющей этому условию, изображены на рис. 2. Примеры соответствия между узлами на решетке T и элементарными ячейками эквивалентной задачи о димерах показаны на рис. 3. Указанное соответствие не является взаимно однозначным. Каждой из ситуаций в узле решетки T, показанных на рис. 4 /a, b, c/, соответствуют три димерных покрытия элементарной ячейки решетки D, а каждой из ситуаций на рис. 4/d, e, f/ - два покрытия. Для остальных ситуаций имеется взаимно-однозначное соответствие.

Таким образом, вместо ожидаемого результата мы получили однозначное соответствие между димерными конфигурациями на решетке D и замкнутыми самоизбе-

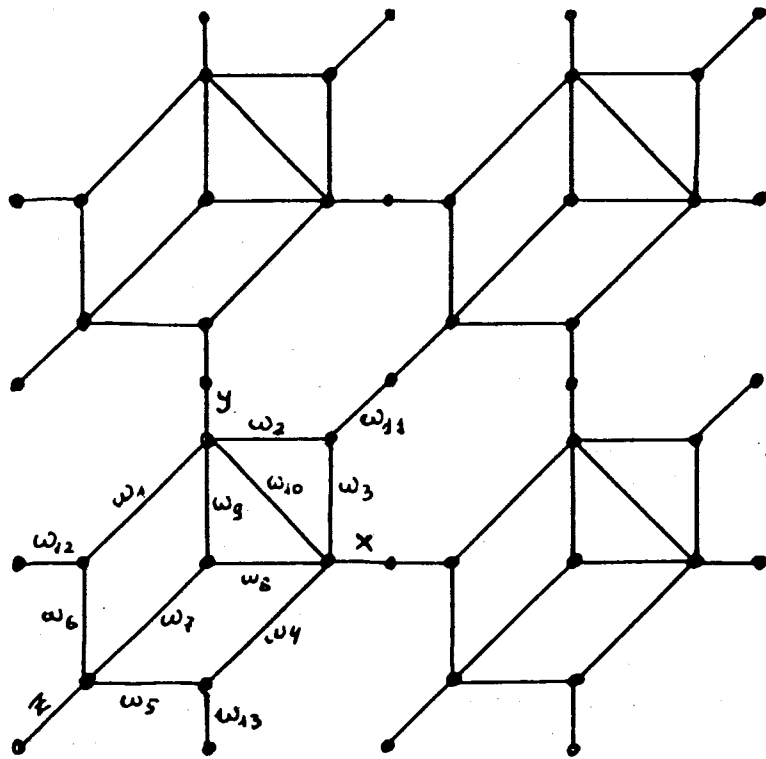


Рис. 2

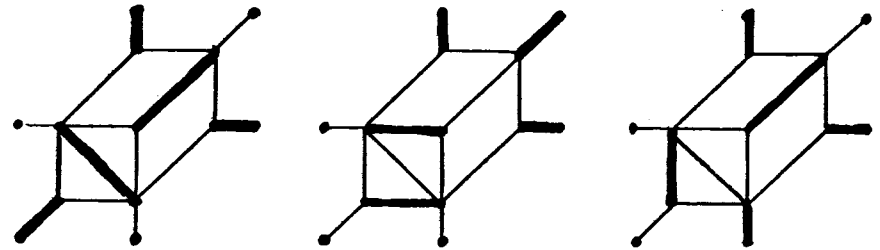


Рис. 3

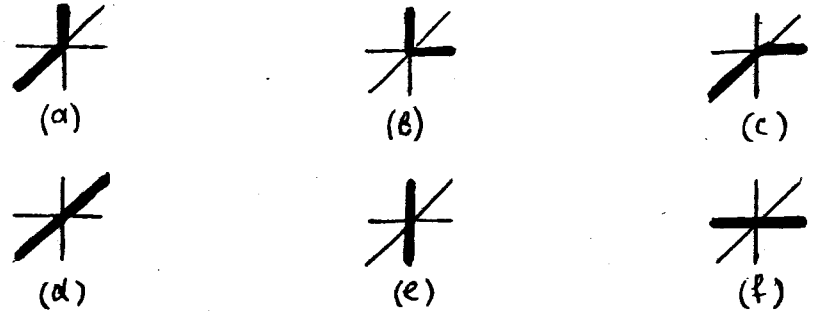


Рис. 4

гающими путями на некоторой модификации треугольной решетки, которую мы обозначим через T\*. Можно считать, что в каждом узле решетки T\* имеются топологические дефекты /"мостики"/, позволяющие случайному пути проходить узел от одного ребра к другому несколькими способами.

В следующем разделе мы найдем точное решение задачи о димерах на решетке D, а затем установим связь между полученной статсуммой и искомой функцией Z(x).

## 2. СТАТСУММА ЗАДАЧИ О ДИМЕРАХ

Перечисление димерных покрытий осуществляется с помощью производящей функции

$$\Phi(x, y, z, \omega_1, \dots, \omega_{13}) = \sum_{\substack{n_x, n_y, n_z, \\ n_1, \dots, n_{13}}} g(n_x, n_y, n_z, n_1, \dots, n_{13}) \times \\ \times x^{n_x} y^{n_y} z^{n_z} \prod_{i=1}^{13} \omega_i^{n_i}, \quad /2/$$

где  $g(n_x, n_y, n_z, n_1, \dots, n_{13})$  - число димерных покрытий с  $n_x$  димерами на горизонтальных связях между элементарными ячейками,  $n_y$  - на вертикальных,  $n_z$  - на наклонных, и с  $n_i$  димерами на ребрах, отмеченных на рис. 2 символами  $\omega_i$ . Символы  $x, y, z, \omega_i$  ( $i=1, \dots, 10$ ) одновременно могут рассматриваться как веса соответствующих ребер.

Отсутствие димера на ребре  $x$  равносильно его присутствию на ребре  $\omega_3$ , либо на  $\omega_4$ , либо на  $\omega_8$ , либо на  $\omega_{10}$ . Это условие можно представить в виде равенства

$$n_x = MN - n_3 - n_4 - n_8 - n_{10}. \quad /3a/$$

Аналогично имеем:

$$n_y = MN - n_1 - n_2 - n_9 - n_{10} \quad /3b/$$

$$n_z = MN - n_5 - n_6 - n_7 \quad /3c/$$

$$n_{12} = MN - n_x = n_3 + n_4 + n_8 + n_{10} \quad /3d/$$

$$n_{13} = MN - n_y = n_1 + n_2 + n_9 + n_{10} \quad /3e/$$

$$n_{11} = MN - n_z = n_5 + n_6 + n_7. \quad /3f/$$

Соотношения /3/ позволяют не рассматривать в явном виде покрытия димерами ребер  $x, y, z, \omega_{11}, \omega_{12}, \omega_{13}$ , а перейти от решетки  $D$  к редуцированной решетке  $\tilde{D}$  /рис. 5/, с меньшим числом точек в элементарной ячейке, что несколько упрощает расчеты.

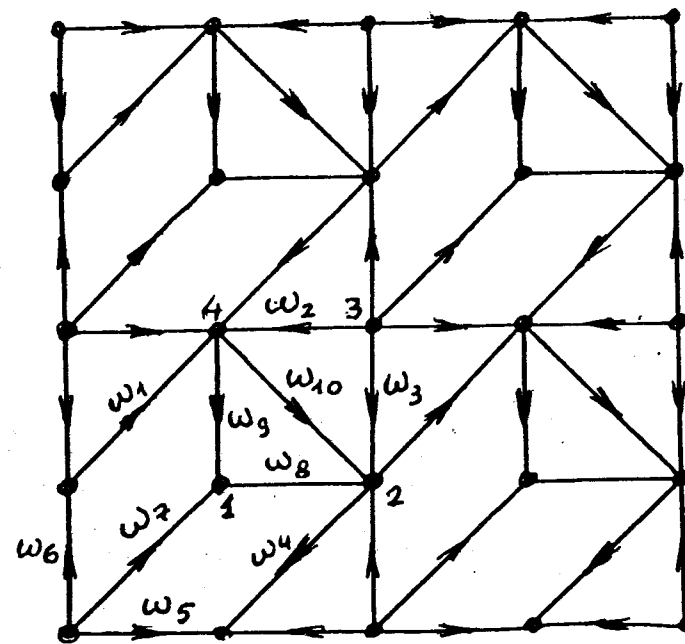


Рис. 5

Производящую функцию димерных покрытий на решетке  $\tilde{D}$  запишем в виде

$$\tilde{\Phi}(\omega_1, \dots, \omega_{10}) = \sum_{n_1, \dots, n_{10}} \tilde{g}(n_1, \dots, n_{10}) \omega_1^{n_1} \dots \omega_{10}^{n_{10}},$$

где  $\tilde{g}(n_1, \dots, n_{10})$  - число димерных покрытий решетки  $\tilde{D}$  с  $n_i$  ( $i=1, \dots, 10$ ) димерами на ребрах с весом  $\omega_i$  /рис. 5/. Существование естественного изоморфизма между покрытиями решетки  $D$  и  $\tilde{D}$  и учет равенств /3/ позволяют выразить функцию  $\Phi(x, y, z, \omega_1, \dots, \omega_{13})$  через  $\tilde{\Phi}(\omega_1, \dots, \omega_{10})$ :

$$\Phi(x, y, z, \omega_1, \dots, \omega_{13}) = (xyz)^{MN} \times$$

$$\tilde{\Phi} \left( \frac{\omega_1 \omega_{13}}{y}, \frac{\omega_2 \omega_{13}}{y}, \frac{\omega_3 \omega_{12}}{x}, \frac{\omega_4 \omega_{12}}{x}, \frac{\omega_5 \omega_{11}}{z}, \right. /4/$$

$$\left. \frac{\omega_6 \omega_{11}}{z}, \frac{\omega_7 \omega_{11}}{z}, \frac{\omega_8 \omega_{12}}{x}, \frac{\omega_9 \omega_{13}}{y}, \frac{\omega_{10} \omega_{12} \omega_{13}}{xy} \right).$$

В дальнейшем нас будет интересовать производящая функция

$$\Phi(x) \equiv \Phi(x, x, x, 1, \dots, 1),$$

которая является производящей функцией числа всех возможных расположений многоугольников на решетке с "мостиками"  $T^*$  и может быть, подобно /1/, представлена в виде

$$\Phi(x) = \sum_n g(n) x^n, \quad /5/$$

где  $g(n)$  - число димерных покрытий решетки  $D$  с суммарным числом димеров на ребрах  $x, y, z$ , равным  $n$ , или число конфигураций многоугольников с периметром  $n$  на решетке  $T^*$ .

Производящая функция  $\tilde{\Phi}(\omega_1, \dots, \omega_{10})$  находится методом пфаффиана. Полное изложение этого метода содержится в работах /7,8/. Здесь мы приведем только схему расчета.

Непосредственно из *рис. 5* следует, что каждое ребро можно снабдить стрелкой так, чтобы в каждом элементарном многоугольнике имелось нечетное число стрелок, направленных по часовой стрелке. Это условие является необходимым для применимости метода пфаффиана.

Введем антисимметричную матрицу  $A$  порядка  $4MN$  с элементами, соответствующими возможным димерным связям между узлами решетки  $D$ . Элемент матрицы  $A$   $a(p, p')$  равен нулю, если узлы  $p$  и  $p'$  не смежны, равен весу ребра  $pp'$ , если оно направлено от  $p$  к  $p'$ , и весу ребра  $pp'$  с обратным знаком, если оно направлено от  $p'$  к  $p$ .

При таком выборе матрицы  $A$  производящая функция равна пфаффиану этой матрицы  $\text{Pf} A$ , который, в свою очередь, выражается через  $\det A$  /7,8/:

$$\tilde{\Phi}(\omega_1, \dots, \omega_{10}) = \text{Pf} A = \sqrt{\det A}. \quad /6/$$

Матрица  $A$  является циклической, если  $a(p, p') = a(p-p')$  причем  $a(N+s) = a(s)$ , где  $N$  - порядок матрицы.

Для того чтобы сконструировать из матрицы  $A$  эквивалентную ей циклическую матрицу, пронумеруем элементарные ячейки вектор-номерами  $\vec{k}$ , где  $\vec{k}$  - вектор с координатами  $k_1, k_2$  ( $k_1 = 1, \dots, M, k_2 = 1, \dots, N$ ). Точки в элементарной ячейке пронумеруем числами  $i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ), так, как показано на *рис. 5*. Элементами циклической матрицы  $MN \times MN$  являются матрицы 4-го порядка:

$$b(\vec{k}, \vec{k}') = b(\vec{k} - \vec{k}') = \begin{pmatrix} a(\vec{k}, 1; \vec{k}', 1) \dots a(\vec{k}, 1; \vec{k}', 4) \\ \dots \\ a(\vec{k}, 4; \vec{k}', 1) \dots a(\vec{k}, 4; \vec{k}', 4) \end{pmatrix} /7/$$

Пара  $(\vec{k}, i)$  в аргументе матричного элемента соответствует одному из  $4MN$  узлов решетки.

Для циклической матрицы  $B$  порядка  $MN$  при  $MN \rightarrow \infty$  имеет место равенство /7,8/.

$$\frac{1}{MN} \ln \det B = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \det \lambda(\phi_1, \phi_2) d\phi_1 d\phi_2, \quad /8/$$

где

$$\lambda(\phi_1, \phi_2) = \sum_{s_1=1}^M \sum_{s_2=1}^N b(\vec{s}) e^{i(s_1 \phi_1 + s_2 \phi_2)} \quad /9/$$

Для решетки  $\tilde{D}$  /*рис. 5*/ формула /9/ с учетом /4/, /7/ дает:

$$\lambda(\phi_1, \phi_2) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{x} & -\frac{1}{x} e^{-i\phi_1 - i\phi_2} & -\frac{1}{x} \\ -\frac{1}{x} & 0 & (-\frac{1}{x} - \frac{1}{x} e^{-i\phi_2}) & (-\frac{1}{x^2} + \frac{1}{x} e^{-i\phi_1 + \frac{1}{x} e^{-i\phi_2}}) \\ \frac{1}{x} e^{i\phi_1 + i\phi_2} (\frac{1}{x} + \frac{1}{x} e^{i\phi_2}) & 0 & (\frac{1}{x} + \frac{1}{x} e^{i\phi_1}) \\ \frac{1}{x} & (\frac{1}{x^2} - \frac{1}{x} e^{-i\phi_1} - \frac{1}{x} e^{i\phi_2}) & (-\frac{1}{x} - \frac{1}{x} e^{-i\phi_1}) & 0 \end{bmatrix} \quad /10/$$

откуда

$$\det \lambda(\phi_1, \phi_2) = H + G [\cos \phi_1 + \cos(\phi_1 + \phi_2) + \cos \phi_1] + \\ + R [\cos(2\phi_1 + \phi_2) + \cos(\phi_1 - \phi_2) + \cos(\phi_1 + 2\phi_2)], \\ H = 12 \frac{1}{x^4} + \frac{1}{x^6}; \quad G = 6 \frac{1}{x^4} - 4 \frac{1}{x^5}; \quad R = 2 \frac{1}{x^4}. \quad /11/$$

Пользуясь соотношениями /5/, /6/, /8/, /11/, получим окончательно:

$$\Phi(x) = \exp \left\{ \frac{3MN}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [H + G(\cos \phi_1 + \cos(\phi_1 + \phi_2) + \cos \phi_2) + \right. \\ \left. + R[\cos(2\phi_1 + \phi_2) + \cos(\phi_1 - \phi_2) + \cos(\phi_1 + 2\phi_2)] d\phi_1 d\phi_2 \right\}. \quad /12/$$

Критическое поведение статсумм вида /12/ широко известно благодаря решению двумерной модели Изинга. Для нахождения критического значения  $x$  положим  $\cos \phi_1 = 1$ ,  $\cos \phi_2 = -1$ , тогда аргумент логарифма под знаком интеграла обращается в нуль при  $x_c = 1/6$ .

В точке  $x_c$  теплоемкость системы имеет логарифмическую особенность.

### 3. ИСКЛЮЧЕНИЕ ДЕФЕКТОВ

Для выяснения связи между полученной статсуммой /12/ и статсуммой исходной задачи /1/ необходимо вычислить среднее число дефектов каждого вида на один шаг пути. Оценим эти величины, исходя из предположения, что все способы, которыми случайный путь может пройти данный узел, равновероятны. На рис. 4 а, б, в изображены ситуации, которые приводят к утроению числа возможных проходов данного узла. Вероятность  $a$  возникновения такой ситуации равна  $a = \frac{3}{15} = \frac{1}{5}$ , так как полное число ситуаций в узле при условии, что случайный путь проходит через данный узел, равно 15. Аналогично, вероятность возникновения ситуации, изображенной на рис. 4/ д, е, ф / ,  $\beta = \frac{1}{5}$ .

Среднее число дефектов первого типа в случайном пути длины  $n$  равно  $na$ , второго типа -  $n\beta$ . Поскольку каждый дефект первого типа утраивает, а второго - удваивает число возможных конфигураций замкнутых многоугольников, мы можем, учитывая /1/, /2/, приближенно написать:

$$d(n) = \frac{g(n)}{3^{na} 2^{n\beta}}, \quad /13/$$

тогда

$$Z(x) = \sum_n g(n) \left( \frac{x}{3^a 2^\beta} \right)^n = \Phi(\tilde{x}), \quad /14/$$

где

$$\tilde{x} = x / (3^a 2^\beta).$$



Критическое значение  $\tilde{x}$ , согласно результату предыдущего пункта, равно  $1/6$ . Для точки фазового перехода исходной задачи имеем

$$x_c = 3^a \cdot 2^\beta \cdot \tilde{x}_c = 3^{\frac{1}{5}} \cdot 2^{\frac{1}{5}} / 6,$$

так что

$$x_c^{-1} = 6^{\frac{4}{5}} = 4,192\dots$$

Значение  $x_c^{-1}$ , вычисленное с помощью рядов <sup>/5/</sup>, составляет  $4,152+0,003$ . Характер особенности теплоемкости системы самоизбегающих путей вследствие /14/ остается логарифмическим.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Temperley H.N. *Phys.Rev.*, 1956, 103, 1.
2. Fisher M.E., Sykes M.F. *Phys.Rev.*, 1959, 114, 45.
3. Wall F.T., Erpenbeck J.J. *J.Chem.Phys.*, 1959, 30, 634.
4. Sykes M.F. e.a. *J.Phys.*, 1972, A5, 653.
5. Hilley B.J., Sykes M.F. *J.Chem.Phys.*, 1961, 34, 1531.
6. Приезжев В.Б. ОИЯИ, P17-9633, Дубна, 1976.
7. Монролл Э.В. В сб.: "Прикладная комбинаторная математика", М., Мир, 1968.
8. Монролл Э.В. В сб.: "Устойчивость и фазовые переходы", М., Мир, 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел  
17 мая 1977 года.