

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



C 326

П-757

3856/2-77

В.Б.Приезжев

P17 - 10735

26/1x-77

МОДЕЛЬ МОНОМЕРОВ И ДИМЕРОВ
С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

1977

P17 - 10735

В.Б.Приезжев

МОДЕЛЬ МОНОМЕРОВ И ДИМЕРОВ
С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Направлено в ТМФ

Приезжев В.Б.

P17 - 10735

Модель мономеров и димеров с взаимодействием

Рассмотрена модель исключенного объема, представленная как модель мономеров и димеров. При взаимодействии только между ближайшими соседями в системе не происходит фазового перехода. При наличии дополнительного взаимодействия большого радиуса найдено точное выражение для статистической суммы изучаемой модели и доказано, что введенное взаимодействие не приводит к возникновению фазового перехода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Priezzhev V. B.

P17 - 10735

The Monomer-Dimer Model with Interaction

The excluded volume model formulated as the monomer-dimer problem is considered. If the interaction between nearest neighbours is taken into account, the phase transition for such a system will be absent. The above mentioned model with addition of the long range interaction is investigated. The exact partition function is found and the absence of the phase transition with addition interaction is stated.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

Модель решеточного газа с твердой сердцевиной может рассматриваться как задача о размещении частиц на вершинах графа, например, на кубической решетке, при условии, что никакие две вершины, занятые частицами, не соединены ребром. В такой интерпретации модель решеточного газа иногда называют моделью исключенного объема. В 1968 году Добрушин^{/1/} доказал существование фазового перехода в моделях исключенного объема на квадратной и кубической решетках. Хейлман^{/2/} распространил этот результат на случай треугольной и гранецентрированной решеток. Дальнейшее развитие модели исключенного объема связано со статистикой мономеров и димеров. Модель димеров сводится к задаче о подсчете числа возможных объединений в неупорядоченные пары смежных вершин графа так, чтобы каждая вершина принадлежала не более чем одной паре^{/3/}. Неупорядоченная пара смежных вершин называется димером, вершина, не принадлежащая ни одной паре, - мономером. В 1972 году Хейлман и Либ^{/2/} доказали отсутствие фазового перехода в системе мономеров и димеров на решетке произвольной размерности при любой, отличной от нуля, плотности мономеров. Между моделью димеров и моделью исключенного объема можно установить соответствие по следующему правилу. Пусть G^* - граф смежности ребер графа G . Это означает, что вершины G^* являются ребрами G и две вершины G^* соединены ребром, если соответствующие ребра в G имеют общую вершину. Модель исключенного объема на G является моделью димеров на G^* ,

поэтому результат работы ^{/2/} означает отсутствие фазового перехода в модели исключенного объема на решетке, являющейся графом смежности произвольной n -мерной решетки.

Рис. 1 иллюстрирует две модели исключенного объема с одинаковым числом смежных вершин ($z=6$) у каждой вершины решетки. В случае треугольной решетки /рис. 1а/, согласно ^{/2/}, имеется фазовый переход. Решетка, изображенная на рис. 1б, является графом смежности ребер квадратной решетки; в этом случае фазовый переход отсутствует.

Сравнение двух приведенных моделей показывает, что проблема существования фазового перехода в модели исключенного объема обнаруживает зависимость от топологии решетки. По этой причине интересно изучить систему, в которой кроме взаимодействия ближайших соседей имелось бы взаимодействие большого радиуса. В настоящей статье рассматривается n -мерная модель исключенного объема, которая сформулирована как модель димеров на некоторой решетке специального вида. Дополнительное взаимодействие определено условием запрещения циклических конфигураций димеров на рассматриваемой решетке. Методом, предложенным ранее ^{/4/}, вычислена статистическая сумма, анализ которой позволяет установить отсутствие фазового перехода в изучаемой системе, несмотря на введенное взаимодействие.

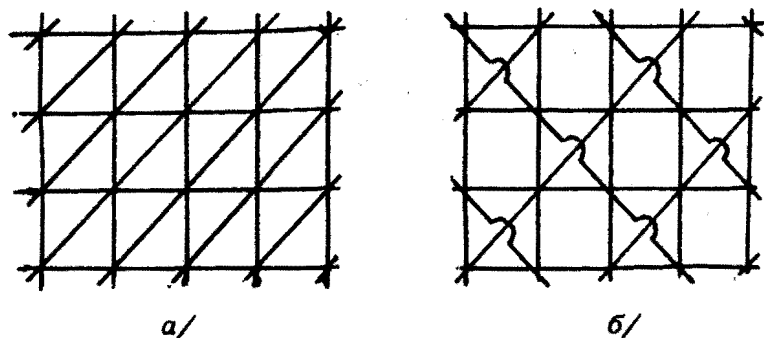


Рис. 1

1. МОДЕЛЬ

Рассмотрим n -мерную целочисленную решетку Z_{Λ}^n /область Λ для простоты будем считать n -мерным кубом/ и $\{s\} \subset Z_{\Lambda}^n$ - множество точек, все координаты которых четны. Две точки $i, j \in Z_{\Lambda}^n$ являются смежными, если расстояние между ними равно единице. Пусть $\{r\} \subset Z_{\Lambda}^n$ - множество точек, не принадлежащих $\{s\}$, и смежных хотя бы с одной точкой из $\{s\}$. Рассмотрим граф $G^{(n)}$, вершинами которого являются точки из $\{s\}$ и $\{r\}$, а ребрами - все отрезки, соединяющие смежные вершины. Вершины из множества $\{s\}$ будем называть s -вершинами, из $\{r\}$ - r -вершинами. В n -мерном графе $G^{(n)}$ s -вершина имеет степень $2n$ / $2n$ прилегающих ребер/, r -вершина - степень 2. Каждая пара вершин, имеющих общее ребро, может быть объединена в димер, причем всегда, если одна из вершин димера является s -вершиной, то другая является r -вершиной, и наоборот. Разбиение множества вершин на совокупность димеров и мономеров называется мономер-димерной /МД/ конфигурацией. Множеству всех возможных разбиений соответствует множество конфигураций \mathcal{D} .

Будем считать, что каждый димер определяет отрезок, направленный от s -вершины, принадлежащей димеру, к другой s -вершине, смежной с r -вершиной, принадлежащей этому же димеру. Последовательность направленных отрезков, в которой начало последующего совпадает с концом предыдущего, является путем, порождаемым МД конфигурацией. Если в пути начало первого отрезка совпадает с концом последнего, путь замкнут. Подмножество МД конфигураций, не порождающих ни одного замкнутого пути, обозначим через \mathcal{D}^* . Теперь мы можем определить модель исключенного объема с дополнительным взаимодействием как задачу о перечислении всех МД конфигураций из \mathcal{D}^* . Точнее, задача состоит в вычислении производящей функции мономеров и димеров для данного графа $G^{(n)}$. Припишем мономерам, являющимся s - и r -вершинами, вес z_s и z_r . Димерам, совпадающим с ребрами, ориентированными вдоль орта e_i ($i=1,2,\dots,n$), припишем вес x_i . Для

каждой МД конфигурации число мономеров, имеющих вес z_s и z_r , обозначим через M_s и M_r , а число димеров с весом x_i - через N_i . Пусть $D(M_s, M_r, N_1, \dots, N_n)$ - конфигурация, имеющая заданные значения чисел мономеров и димеров $M_s, M_r, N_1, \dots, N_n$. Тогда производящая функция записывается в виде:

$$\Phi(z_s, z_r, x_1, \dots, x_n) = \sum_{M_s, M_r} \sum_{D(M_s, M_r, N_1, \dots, N_n) \in \mathcal{D}^*} z_s^{M_s} z_r^{M_r} x_1^{N_1} \dots x_n^{N_n} \quad /1/$$

Придавая аргументам z_s, z_r, \dots, x_n статистический смысл, т.е. полагая $z_s = \exp(-J_s/kT)$, $z_r = \exp(-J_r/kT)$, $x_i = \exp(-J_i/kT)$, где J_s, J_r, J_i - значения энергии, связанной с наличием в системе мономера или димера, а T - температура, получим статистическую сумму исследуемой задачи.

Величины $M_s, M_r, N_1, \dots, N_n$ не являются независимыми, между ними имеется несколько простых соотношений. Пусть \mathcal{L} - число точек множества $Z_{\mathcal{L}}^n$, из которых \mathcal{L}_s являются s -вершинами, а \mathcal{L}_r - r -вершинами. Для n -мерной решетки имеем $\mathcal{L}_r = n \mathcal{L}_s$, поэтому $\mathcal{L}_s = \mathcal{L}/(1+n)$ и $\mathcal{L}_r = n \mathcal{L}/(1+n)$. С другой стороны, полное число точек может быть выражено через число мономеров и димеров:

$$\mathcal{L} = M_s + M_r + 2 \sum_{i=1}^n N_i \quad /2/$$

и, аналогично,

$$\mathcal{L}_{s(r)} = M_{s(r)} + \sum_{i=1}^n N_i \quad /3/$$

так что

$$M_s = \mathcal{L}/(1+n) - \sum_{i=1}^n N_i \quad /4/$$

$$M_r = n \mathcal{L}/(1+n) - \sum_{i=1}^n N_i$$

Таким образом, производящая функция /1/ полностью определяется значениями переменных x_i ($i = 1, 2, \dots, n$), однако ради удобства мы сохраним аргумент z_s и в дальнейшем будем иметь дело с функцией

$$\Phi(z_s, \vec{x}) = \sum_{M_s, \vec{N}} \sum_{D(M_s, \vec{N}) \in \mathcal{D}^*} z_s^{M_s} \prod_{i=1}^n x_i^{N_i} \quad /5/$$

где

$$\vec{x} \equiv (x_1, x_2, \dots, x_n), \quad \vec{N} \equiv (N_1, N_2, \dots, N_n).$$

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПРОИЗВОДЯЩЕЙ ФУНКЦИИ

Метод расчета производящей функции /5/ основан на одном результате работы /4/. Приведем здесь этот результат в терминах настоящей статьи. В п.1 был определен замкнутый путь, порождаемый МД конфигурацией и проходящий через s -вершины графа G^n . Дополним это определение, а именно, помимо уже определенных замкнутых путей будем считать замкнутым путем и "элементарную петлю", возникшую, если бы между двумя соседними s -вершинами имелось два противоположно направленных отрезка. Обозначим через Γ конфигурацию замкнутых непересекающихся путей $\{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_k\}$. Для каждого пути $\gamma \in \Gamma$ определим функцию

$$W(\gamma) = (-1)^n \prod_{i=1}^n x_i^{N_i},$$

где N_i - число участков пути γ , ориентированных вдоль или против орта \vec{e}_i . Утверждение, вытекающее из теоремы 3 работы /4/, теперь можно сформулировать следующим образом:

$$\sum_{\gamma \in \Gamma} \prod_{a_1=0}^{L/2-1} \dots \prod_{a_n=0}^{L/2-1} W(\gamma) = \prod_{a_1=0}^{L/2-1} \dots \prod_{a_n=0}^{L/2-1} (1 + R(x_1, x_2, \dots, x_n)), \quad /6/$$

где

$$R(x_1, x_2, \dots, x_n) = 2 \sum_{i=1}^n x_i \cos \frac{2\pi a_i}{L/2} \quad /7/$$

Суммирование в левой части равенства /6/ производится по всем возможным конфигурациям замкнутых путей, проходящих через s -вершины графа $G^{(n)}$, а L - размер куба Λ , содержащего точки Z_Λ^n . Для наших целей важно заметить, что любой путь γ , принадлежащий каждой конфигурации, содержит множитель $/-1/$, поэтому вес каждой конфигурации Γ , входящей в сумму /6/, имеет знак $/-1/^k$, где k - число замкнутых путей, содержащихся в Γ .

Вычисление производящей функции /5/ проведем следующим образом. Зададим некоторые значения величин M_s, N_1, \dots, N_n и рассмотрим покрытие $C(M_s, \vec{N})$ ребер графа $G^{(n)}$ отрезками единичной длины так, чтобы каждое ребро было покрыто не более чем одним отрезком. Для каждого покрытия потребуем, чтобы N_i ($i=1, 2, \dots, n$) отрезков имели направление e_i . Такое покрытие оставляет незанятыми M_s s -вершин, число которых, согласно равенству /4/, равно $L/(1+n) - \sum_{i=1}^n N_i$. Множество

всех возможных покрытий $\{C(M_s, \vec{N})\}$ отличается от множества димерных конфигураций $\{D: D(M_s, N) \in \mathcal{D}\}$ единственным свойством: по определению димера, в $\{D\}$ отсутствуют конфигурации с двумя димерами на отрезке, соединяющем соседние s -вершины. В остальном покрывающие отрезки полностью эквивалентны димерам и мы можем, в частности, определить путь или совокупность путей, порождаемую покрытием $C(M_s, \vec{N})$. Приписывая N отрезкам конфигурации $C(M_s, \vec{N})$ вес x_i и вес z_s каждой из незанятых s -вершин, получим следующее выражение для производящей функции покрывающих конфигураций:

$$F(z_s, \vec{x}) = \sum_{M_s, \vec{N}} \sum_{C(M_s, \vec{N})} z_s^{M_s} \prod_{i=1}^n x_i^{N_i} =$$

$$= (z_s + 2x_1 + 2x_2 + \dots + 2x_n)^{N_s} \quad /8/$$

Последнее равенство следует из того, что каждая s -вершина может быть покрыта отрезком независимо двумя способами в каждом из n направлений, либо оставаться непокрытой. Производящую функцию $\Phi(z_s, \vec{x})$ можно получить из $F(z_s, \vec{x})$, если из суммы в правой части второго равенства /8/ исключить суммирование по конфигурациям, отсутствующим в \mathcal{D}^* . Для выполнения этой процедуры воспользуемся, как и в работе /4/, комбинаторным методом включения - исключения /см., например, /5/ /. Введем следующие обозначения: $|C(M_s, \vec{N})_{\gamma_1}|$ - число покрытий графа $G^{(n)}$, порождающих по крайней мере один замкнутый путь γ_1 , $|C(M_s, \vec{N})_{\gamma_1, \gamma_2}|$ - два замкнутых пути γ_1 и γ_2 и т.д. Число элементов множества димерных конфигураций, не порождающих ни одного контура $\{D: D(M_s, N) \in \mathcal{D}^*\}$, согласно принципу включения-исключения, равно:

$$|\{D: D(M_s, \vec{N}) \in \mathcal{D}^*\}| = |C(M_s, \vec{N})| - \sum_{\gamma_1} |C(M_s, \vec{N})_{\gamma_1}|$$

$$+ \sum_{\gamma_1, \gamma_2} |C(M_s, \vec{N})_{\gamma_1, \gamma_2}| + \dots + (-1)^r \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_r} |C(M_s, \vec{N})_{\gamma_1, \dots, \gamma_r}|$$

$$+ \dots + (-1)^m \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_m} |C(M_s, \vec{N})_{\gamma_1, \dots, \gamma_m}|, \quad /9/$$

где суммирование в k -том члене правой части проводится по всем возможным конфигурациям непересекающихся путей $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{k-1}$, а m - максимальное число непересекающихся замкнутых путей, которые могут быть размещены на графе $G^{(n)}$ при заданных значениях M_s, N_1, \dots, N_n .

Перейдем теперь равенство /8/ в виде

$$F(z_s, \vec{y}) = \prod_{a_1=0}^{L/2-1} \dots \prod_{a_n=0}^{L/2-1} (z_s + 2y_1 + \dots + 2y_n), \quad /10/$$

переобозначив переменные x_1, \dots, x_n на y_1, \dots, y_n .

Из правых частей равенств /6/ и /10/ образуем форму

$$\prod_{a_1=0}^{L/2-1} \dots \prod_{a_n=0}^{L/2-1} (z_s + 2 \sum_{i=1}^n y_i + 2 \sum_{i=1}^n x_i \cos \frac{2\pi a_i}{L/2}). \quad /11/$$

Разложим это произведение на сумму произведений сомножителей и рассмотрим коэффициент

$$u(M_s, K_1, \dots, K_n, L_1, \dots, L_n)$$

при члене $z_s^{M_s} y_1^{K_1} \dots y_n^{K_n} x_1^{L_1} \dots x_n^{L_n}$, выбранный при условии

$$M_s + \sum_{i=1}^n K_i + \sum_{i=1}^n L_i = N$$

/12/

$$K_i + L_i = N_i \quad 1 \leq i \leq n.$$

Согласно формулам /6/, /7/, /8/, этот коэффициент равен сумме конфигураций отрезков, покрывающих граф $G^{(n)}$, в таких, что в каждой конфигурации имеется M_s незанятых s -вершин, K_i ($i=1, 2, \dots, n$) отрезков расположены произвольным образом в направлении \vec{e}_i , а остальные $\sum_{i=1}^n L_i$ отрезков порождают замкнутые

пути, причем каждый путь входит в сумму по конфигурациям со знаком "минус" и имеет L_i шагов в направлении \vec{e}_i . Сумма коэффициентов $u(M_s, K_1, \dots, K_n, L_1, \dots, L_n)$ по всем K, L при условии /12/ равна правой части уравнения /9/, и, следовательно, равна числу элементов множества $\{D: D(M_s, N) \in \mathcal{D}^*\}$ при заданных M_s, N .

Возвращаясь к определению /5/ производящей функции, видим, что

$$\sum_{D(M_s, N) \in \mathcal{D}^*} z_s^{M_s} \prod_{i=1}^n x_i^{N_i} = \sum_{\vec{K} + \vec{L} = \vec{N}} u(M_s, \vec{K}, \vec{L}) z_s^{M_s} \prod_{i=1}^n y_i^{K_i} x_i^{L_i} \quad /13/$$

Перебирая последовательно коэффициенты разложения /11/ при всех возможных значениях M_s, \vec{N} , приходим к выражению для искомой функции

$$\Phi(z_s, \vec{x}) = \prod_{a_1=0}^{L/2-1} \dots \prod_{a_n=0}^{L/2-1} (z_s + 2 \sum_{i=1}^n x_i + 2 \sum_{i=1}^n x_i \cos \frac{2\pi a_i}{L/2}). \quad /14/$$

Прологарифмируем выражение /14/ и перейдем в полученной сумме к интегралу при $L \rightarrow \infty$. Окончательное выражение для производящей функции примет вид:

$$\Phi(z_s, \vec{x}) = \exp \left\{ \left(\frac{L}{4\pi} \right)^n \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \ln \left[z_s + 2 \sum_{i=1}^n x_i (1 + \cos \phi_i) \right] d\phi_1 \dots d\phi_n \right\}. \quad /15/$$

В одномерном случае /15/ переходит в известное выражение для производящей функции задачи о димерах и мономерах /6/

$$\Phi(z, x) = \exp \left\{ \frac{L}{4\pi} \int_0^{2\pi} \ln (z + 2x + 2x \cos \phi) d\phi \right\}, \quad /16/$$

как и следовало ожидать, так как дальнедействующее взаимодействие, обусловленное исключением замкнутых путей, исчезает.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Непосредственно из явного выражения /15/ для статистической суммы $\Phi(z, \vec{x})$ следует, что при всех $z > 0$ и $n \geq 1$ свободная энергия и все ее производные не имеют особенностей. Это означает, что в рассмотренной системе фазовый переход отсутствует при любой отличной от нуля плотности мономеров. Таким образом, введенное взаимодействие не приводит к возникновению фазового перехода в системе мономеров и димеров, которая без этого взаимодействия, согласно результату Хейлмана и Либа^{/2/}, не обладает критическим поведением.

До сих пор мы не обсуждали вопроса о том, как зависит величина введенного взаимодействия от расстояния. В рассмотренной задаче взаимодействие определяется запрещенными конфигурациями димеров, представляющими совокупность замкнутых путей без самопересечений. Величина взаимодействия в зависимости от расстояния $|\vec{r}|$ может быть определена как вероятность прохождения случайного пути без самопересечений через точку \vec{r} при условии, что путь начинается и кончается в начале координат. К сожалению, задача о случайном

блуждании без самопересечений, в свою очередь, является нерешенной проблемой^{/7/}, однако некоторое представление об интересующей нас вероятности дают результаты численного анализа, проведенного в работе^{/8/}. Прямое перечисление случайных путей, содержащих 18 шагов в двумерном случае / $-125 \cdot 10^6$ конфигураций/ и 13 шагов в трехмерном случае / $-950 \cdot 10^6$ конфигураций/ показывает, что закон распределения концов самоизбегающего пути может быть описан функцией

$$F(r) = A \exp(-|r|^\nu),$$

где $\nu = 4$ для квадратной решетки и $\nu = 5/2$ - для кубической. Приведенные данные позволяют предположить, что радиус введенного взаимодействия растет с ростом размерности решетки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Добрушин Р.Л. Теория вероятности и ее применение, 1965, 10, с.209.
2. Heilman O.J., Lieb E.H. *Comm.Math.Phys.*, 1972, 25, p.190.
3. Монролл Э.В. В кн.: "Прикладная комбинаторная математика", Мир, М., 1968.
4. Приезжев В.Б. ТМФ, 1977, 31, 1, с.89.
5. Холл М. Комбинаторика. Мир., М., 1970.
6. Wu F.Y. *Phys.Lett.*, 1973, 43A, p.21.
7. Спизер Ф. Принципы случайного блуждания. Мир, М., 1969.
8. Domb C., Gillis J., Wilmers G. *Proc. Phys. Soc.*, 1965, 85, p.625.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 июня 1977 года.