

е  
т

объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
дубна

899/2-81

23/11-81  
P17-80-760

Н.Ангелеску, В.Б.Приезжев

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД  
В МОДЕЛИ ДЛИННЫХ ПОЛИМЕРОВ  
С ИСКЛЮЧЕННЫМ ОБЪЕМОМ

Направлено в "Journal of Physics A"

1980

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Решеточные модели полимеров с исключенным объемом широко используются для объяснения свойств систем длинных молекул, взаимодействующих посредством сил отталкивания. Среди основных проблем, возникающих при изучении этих моделей, находится вопрос о существовании предела термодинамических функций и вопрос о наличии фазового перехода. В 1971 г. Грубер и Кунц<sup>/1/</sup> доказали существование термодинамического предела для давления в модели полимеров при весьма общих условиях, предъявляемых к форме и размеру полимеров. В работах<sup>/1,2/</sup> было доказано отсутствие фазового перехода в простейшей полимерной системе - смеси мономеров и димеров. Обобщение этого результата на случай более сложных полимеров пока не получено.

Другой тип задач возникает, если в системе полимеров кроме исключенного объема имеется дополнительное взаимодействие. При подходящей величине и знаке взаимодействия в такой системе может возникнуть фазовый переход. Доказательство существования фазового перехода, как правило, проводится с помощью контурного метода, предложенного Пайерлсом<sup>/3/</sup> для доказательства существования дальнего порядка в модели Изинга. В работах<sup>/4-6/</sup> с помощью метода Пайерлса изучались различные модели взаимодействующих твердых стержней.

Использование этого метода значительно упрощается, если модель обладает свойством отражательной четности<sup>/7/</sup>. Недавно<sup>/8,9/</sup> аргументы Пайерлса в сочетании с отражательной четностью были применены для доказательства существования фазового перехода в моделях димеров, в которых взаимодействие определялось так, чтобы модель воспроизводила основные свойства жидких кристаллов. К сожалению, свойство отражательной четности выполняется для довольно ограниченного класса решеточных моделей; в частности, пока не удалось воспользоваться этим свойством при рассмотрении систем молекул более длинных, чем димеры.

В настоящей работе предложена двумерная модель длинных полимерных молекул, не касающихся друг друга и не самопересекающихся из-за короткодействующих сил отталкивания. Кроме того, имеется дополнительное взаимодействие между звеньями полимерной цепочки. Знак его выбран таким, что в основном состоянии звенья полимера выстраиваются в прямую линию. Все

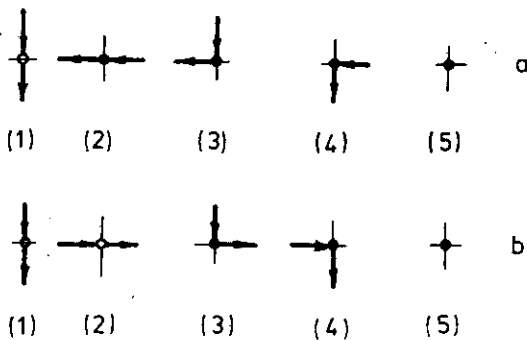


Рис. 1

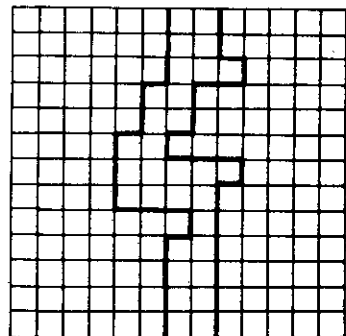


Рис. 2

звенья полимера имеют одинаковый химический потенциал. Конфигурация полимеров на квадратной решетке удовлетворяет требованиям, сформулированным в п.2.

С методической точки зрения эта модель обладает двумя особенностями. Во-первых, из-за внутримолекулярного взаимодействия и отсутствия стабильности химического потенциала /см.п.3/ на нее не распространяется доказательство существования предела термодинамических величин, данное Грубером и Кунцем<sup>/1/</sup>. Во-вторых, дополнительные требования к конфигурации полимера таковы, что модель обладает свойством отражательной четности только в одном направлении.

Физические свойства модели определяются "длинной памятью" и сильной зависимостью состояния системы от граничных условий. В п.4 мы докажем, что при достаточно низких температурах система находится в основном состоянии /не обязательно вырожденном/ со свободной энергией, равной нулю в некотором интервале температур. В случае высоких температур существует ненулевой предел свободной энергии при стремлении объема системы к бесконечности. Следовательно, эта модель претерпевает фазовый переход, т.е. свободная энергия неаналитична по температуре, а при низких температурах существует макроскопическое заполнение основного состояния.

## 2. МОДЕЛЬ

Пусть  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$  - квадратная решетка размером  $2M \times 2N$ , свернутая в тор для создания периодических граничных условий. Конфигура-

ционное пространство определим, задавая все возможные расположения стрелок на ребрах решетки, подчиняющиеся следующим условиям:

- (i) Каждое ребро решетки либо свободно, либо занято стрелкой.
- (ii) В каждой вершине  $(x, y) \in \Lambda$  возможна одна из конфигураций стрелок, изображенных на рис.1 а, если  $y$  четно, и на рис.1 б, если  $y$  нечетно.

Вершины типа /1/ и /2/ назовем хорошими и припишем им нулевую энергию. Остальные вершины назовем плохими. Припишем энергию  $a$  вершинам типа /3/ и /4/ и энергию  $a + \mu$  вершинам типа /5/. Мы предполагаем, что  $a > 0$ ,  $a + \mu > 0$ , и в дальнейшем будем пользоваться обозначением  $\epsilon = \min(a, a + \mu)$ ,  $\epsilon' = \max(a, a + \mu)$ . Энергия конфигурации стрелок на  $\Lambda$ , подчиняющейся правилам (i), (ii), есть сумма энергий всех вершин.

Отождествим с каждым ребром, занятым стрелкой, звено полимера, расположенное на этом ребре. Типичная конфигурация полимеров показана на рис.2. Выпишем для дальнейших справок следующие свойства модели, непосредственно вытекающие из правил (i), (ii):

1. Полимерная цепочка образует на торе замкнутый путь, т.к. она не имеет ни начала, ни точки окончания.
2. Две хорошие вершины могут быть ближайшими соседями только тогда, когда они принадлежат к одному типу.
3. Каждая плохая вершина соседствует по крайней мере с одной плохой вершиной.
4. Если на горизонтальной строке решетки имеется последовательность  $k+2$  вершин, которые все, кроме первой и последней, плохие, то среди смежных  $k+2$  вершин на нижней строке должна быть хотя бы одна плохая вершина. Действительно, если все вершины на нижней строке хорошие, то они принадлежат к одному и тому же типу. К этому же типу должны принадлежать и крайние вершины на верхней строке, но тогда остальные  $k$  вершин на этой строке должны быть хорошими, что противоречит условию./
5. Если все вершины некоторой строки хорошие, то на любой другой строке все вершины либо также хорошие, либо принадлежат к типу /5/. Конфигурации, обладающие последним свойством, назовем тривиальными. Вклад тривиальных конфигураций в статсумму равен

$$Z_{\Lambda}^{(t)} = 1 + \sum_{k=0}^{2N} C_{2N}^k e^{-\beta k \cdot 2M(a+\mu)} = 1 + (1 + e^{-2\beta M(a+\mu)})^{2N}.$$

6. Под термодинамическим пределом  $\Lambda \rightarrow \infty$  мы будем понимать предел  $\min(N, M) / \log \max(N, M) \rightarrow \infty$ . При этом условии имеем

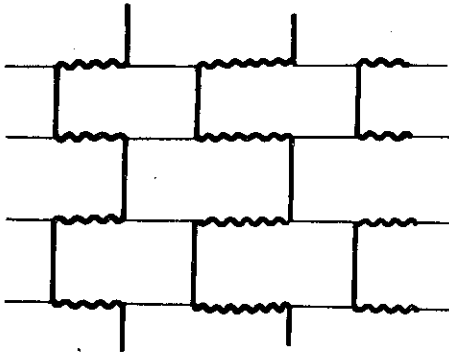


Рис. 3

$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} Z_{\Lambda}^{(t)} = 2$  /равномерно по  $\beta \geq \beta_0$  для произвольных  $\beta_0 > 0$  /.  
 Модель полимеров, сформулированная выше, может быть представлена как эквивалентная ей модель димеров на гексагональной решетке. Для этого рассмотрим двумерную гексагональную решетку с различным множеством ребер, изображенных на рис. 3 волнистыми линиями. Как и ранее, предполагаются выполненными периодические граничные условия.

Рассмотрим все возможные плотные упаковки димеров на этой решетке /т.е. такие, что каждая вершина покрыта одним и только одним димером/. Каждому димеру, расположенному на простом /не волнистом/ ребре, припишем химический потенциал  $\mu$ , а каждой паре параллельных димеров, примыкающих к одному волнистому ребру, - энергию взаимодействия  $-a$ . Легко убедиться в том, что исходная модель полимеров получится, если мы стянем в точку все волнистые ребра решетки, а каждый димер, лежащий на простом ребре, отождествим со звеном полимера. Возможность представить нашу модель в виде модели димеров на декорированной гексагональной решетке означает, что при  $a=0$  задача о вычислении статистической суммы может быть решена точно методом пфаффiana /10/.

### 3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ

Поскольку конфигурации модели состоят из полимеров, охватывающих тор, доказательство статистической независимости различных областей затруднено, если пользоваться традиционными методами, приспособленными для систем с конечным радиусом взаимодействия. Тем не менее следующая лемма, устанавливающая супераддитивность свободной энергии, дает возможность доказать существование термодинамического предела.

**Лемма.** Пусть  $\Lambda, \Lambda'$  - прямоугольники со сторонами  $(2M, 2N)$  и  $(2M', 2N')$  соответственно;  $M' = mM + r$ ,  $N' = nN + s$ , где  $m, n$  - положительные целые числа и  $0 \leq r < M$ ;  $0 \leq s < N$ . Тогда

$$Z_{\Lambda'} \geq Z_{\Lambda}^{mn} \cdot 2^{-(M+N)mn} e^{-\beta\epsilon'(MN' + NM')} \quad /3.1/$$

Доказательство. Для каждой конфигурации  $C$  в  $\Lambda$  обозначим через  $B_h$  /соответственно через  $B_v$  / конфигурацию горизонтальных /вертикальных/ ребер, соединяющих между собой противоположные стороны  $\Lambda$ . Для данных  $B_h, B_v$  обозначим через  $\mathcal{C}_{\Lambda}(B_h, B_v)$  множество всех конфигураций в  $\Lambda$ , совместимых с  $B_h$  и  $B_v$ . Пусть

$$Z_{\Lambda}(B_h, B_v) = \sum_{C \in \mathcal{C}_{\Lambda}(B_h, B_v)} e^{-\beta E(C)}$$

Очевидно, что

$$Z_{\Lambda} = \sum_{B_h, B_v} Z_{\Lambda}(B_h, B_v).$$

Рассмотрим теперь  $\Lambda$  как подмножество  $\Lambda'$ . Транслируя  $\Lambda$  вдоль оси  $y$ , а затем вдоль оси  $x$ , мы получим  $mn$  различных копий  $\Lambda$ , вложенных в  $\Lambda'$ . Каждая совокупность конфигураций  $C_1, \dots, C_{mn} \in \mathcal{C}_{\Lambda}(B_h, B_v)$  может быть дополнена до конфигурации в  $\Lambda'$  путем соединения прямыми линиями всех граничных точек смежных копий  $\Lambda$ . Таким образом,

$$Z_{\Lambda'} \geq \sum_{B_h, B_v} Z_{\Lambda}(B_h, B_v)^{mn} e^{-\beta\epsilon'(rN' + sM')},$$

где последний фактор возник из-за связей между различными копиями  $\Lambda$ . Поскольку в сумме имеется  $2^{M+N}$  членов, неравенство /3.1/ следует из неравенства Гельдера:

$$\eta^{k-1} \prod_{i=1}^k |a_i|^k \geq \left| \sum_{i=1}^k a_i \right|^k.$$

Логарифмируя /3.1/, мы получим для удельной свободной энергии

$$f_{\Lambda} = -|\Lambda|^{-1} \beta^{-1} \log Z_{\Lambda} \quad /3.2/$$

неравенство

$$f_{\Lambda'} \leq \frac{mMnN}{M'N'} f_{\Lambda} + \frac{(M+N)mn}{\beta M'N'} + \epsilon \cdot \frac{M'N' + N'M}{M'N}. \quad /3.3/$$

Выберем теперь из последовательности прямоугольников подпоследовательность  $\Lambda_k$  /со сторонами  $M_k, N_k \rightarrow \infty$  / такую, что  $f_{\Lambda_k}$  сходится к  $\liminf_{\Lambda} f_{\Lambda} \equiv \underline{f}$ , и другую подпоследовательность  $\Lambda'_k$  /со сторонами  $M'_k, N'_k \rightarrow \infty$  / такую, что  $f_{\Lambda'_k}$  сходится к  $\limsup_{\Lambda} f_{\Lambda} = \bar{f}$ , причем  $M'_k/M_k \rightarrow \infty$  и  $N'_k/N_k \rightarrow \infty$ . Тогда в пределе  $k \rightarrow \infty$  из неравенства /3.3/ мы получим  $\bar{f} \leq \underline{f}$ , что означает существование термодинамического предела.

Замечание. Вместо периодических граничных условий вдоль вертикальной оси мы можем выбрать свободные условия на левой и правой границе, рассматривая область  $\Lambda_{k,\ell}$  как цилиндр. При этом мы отбрасываем из числа всех возможных полимерных конфигураций на торе те, которые пересекают некоторую фиксированную линию, в частности, одну из конфигураций основного состояния и все тривиальные конфигурации. Доказательство существования термодинамического предела не изменится, если заметить, что  $Z_{\Lambda_{k,\ell}} \geq Z_{\Lambda_{k-1,\ell}}^2$ , поскольку в правой части неравенства опущена сумма по всем конфигурациям, пересекающим центральную вертикальную линию.

#### 4. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Основным техническим средством последующего доказательства будет свойство отражательной четности, к описанию которого мы приступаем. Пусть  $\mathcal{C}$  есть множество всех возможных конфигураций вершин, удовлетворяющих правилу (ii). Для каждой пары горизонтальных линий:  $\ell_k = \{y = k - \frac{1}{2}\}$  и  $\ell'_k = \{y = k + N - \frac{1}{2}\}$ ,

$k = 1, 2, \dots, N$ , определим  $\mathcal{C}_{k+}(\mathcal{C}_{k-})$  как множество конфигураций вершин, расположенных выше  $\ell_k$  и ниже  $\ell'_k$  /соответственно выше  $\ell'_k$  и ниже  $\ell_k$ /. Определим  $\theta_k: \mathcal{C}_{k+} \rightarrow \mathcal{C}_{k-}$  как отображение конфигурации вершины  $(x, k+y)$  в симметричную конфигурацию вершины  $(x, k-y-1)$  с обращенными стрелками. Положим далее, что  $\tau_k: \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}$  есть трансляция конфигурации вершины  $(x, y)$  в вершину  $(x, y + 2k)$ .

Пусть  $\mathcal{A}$  - алгебра всех функций на  $\mathcal{C}$ ;  $\mathcal{A}_{k\pm}$  - подалгебры всех функций, зависящих от  $\mathcal{C}_{k\pm}$  соответственно и  $\theta_k: \mathcal{A}_{k+} \rightarrow \mathcal{A}_{k-}$ ,  $\tau_k: \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$  - индуцированные отображения ( $\theta_k f(\mathcal{C}) = f(\theta_k \mathcal{C})$ ).

Лемма. /I/ Для каждого  $k=1, \dots, N$   $\langle f \theta_k f \rangle_{\Lambda} \geq 0$  при всех  $f \in \mathcal{A}_{k+}$  /отражательная четность/.

/II/ Если функции  $Q_y$ ,  $y=1, \dots, 2N$ , зависят только от конфигураций вершин на строке  $y$ , то

$$\langle \prod_{y=1}^{2N} Q_y \rangle_{\Lambda} \leq \prod_{y=1}^{2N} \langle [Q]_y \rangle_{\Lambda}^{1/2N}, \quad /4.1/$$

где

$$[Q]_y = \prod_{k=0}^{N-1} r_k \{ Q_y \theta_y Q_y \}.$$

Доказательство. Согласно определению средних в нашей модели имеем

$$\langle f \rangle_{\Lambda} = Z_{\Lambda}^{-1} \sum_{C \in \mathcal{C}} \chi(C) f(C) e^{-\beta N(C)}, \quad /4.2/$$

где

$$Z_{\Lambda} = \sum_{C \in \mathcal{C}} \chi(C) e^{-\beta N(C)}$$

- статсумма;  $N(C)$  - сумма энергий всех вершин решетки, а  $\chi$  - характеристическая функция конфигураций, удовлетворяющих правилу (i). Для каждой пары линий отражения  $\chi = (\chi_{k+}) (\chi_{k^0}) (\chi_{k-})$ , где  $\chi_{k+} \in \{0, 1\}$ ;  $\chi_{k-} = \theta_k \chi_{k+}$ ;  $\chi_{k^0}(C) = 1$ , если правило (i) выполняется для ребер, пересекающих линию отражения, и  $\chi_{k^0}(C) = 0$  в противном случае. Энергия системы представляется в виде

$$N = (N_{k+}) + (\theta_k N_{k+}),$$

где  $N_{k+}(C)$  - сумма всех энергий вершин для конфигураций, принадлежащих  $\mathcal{C}_{k+}$ . Это означает справедливость //; // является хорошо известным следствием // /обобщенное неравенство Гёльдера<sup>17/</sup>.

Утверждение. Обозначим через  $P_{0\Lambda}$  вероятность того, что все вершины  $\Lambda$  хорошие. Тогда существуют две константы  $0 < c_1 < c_2 < \infty$  такие, что

$$(i) \text{ для } \beta < c_1 / \epsilon' \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} P_{0\Lambda} = 0 \text{ и } \liminf_{\Lambda \rightarrow \infty} |\Lambda|^{-1} \log Z_{\Lambda} > 0,$$

$$(ii) \text{ для } \beta > c_2 / \epsilon \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} P_{0\Lambda} = 0 \text{ и } \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} |\Lambda|^{-1} \log Z_{\Lambda} = 0.$$



**Доказательство.** (i) Поскольку  $P_{0\Lambda} = 2/Z_{\Lambda}$ , достаточно показать, что  $|\Lambda|^{-1} \log Z_{\Lambda} \geq B > 0$  для  $B$ , не зависящего от  $\Lambda$ . Разделим  $\Lambda$  на вертикальные полосы, по три колонки в каждой, и рассмотрим вклад в статсумму только от конфигураций полимеров, содержащихся в каждой полосе. Расположение полимера в полосе определим последовательностью 0 и 1, приписывая 0 вертикальному звену на центральной колонке и 1 - вертикальному звену на одной из боковых колонок. Каждой такой последовательности соответствует по крайней мере одна конфигурация полимера; всего имеется  $2^{2N[2M/3]}$  таких конфигураций. Поэтому  $Z_{\Lambda} \geq 2^{2N[2M/3]} e^{-|\Lambda|\beta\epsilon'}$  и  $|\Lambda|^{-1} \log Z_{\Lambda} \geq 3^{-1} \log 2 - \beta\epsilon'$ , что приводит к (i) с константой  $c_1 < 3^{-1} \log 2$ .

(ii) Докажем, что вероятность возникновения нетривиальной конфигурации в  $\Lambda$  стремится к нулю для  $\beta > c_2/\epsilon$  при  $N/\log M \rightarrow \infty$ . Согласно следствиям 4 и 5 в каждой нетривиальной конфигурации на любой строке  $y$  можно выбрать максимальное множество смежных плохих вершин  $\Gamma_y$  так, что

$$\min\{|x-x'| : (x,y) \in \Gamma_y, (x',y-1) \in \Gamma_{y-1}\} \leq 1, y = 2, 3, \dots, 2N. \quad /4.3/$$

Набор  $\{\Gamma_y ; y=1, \dots, 2N\}$ , удовлетворяющий условию /4.3/, назовем контуром. Вероятность возникновения нетривиальной конфигурации оценивается сверху суммой по всем возможным контурам от вероятности данного контура. Мы покажем, что для этой вероятности справедливы оценки

$$P_{\Lambda, \beta}(\{\Gamma_y\}) \leq [3e^{-\beta\epsilon}]_y \sum_{y=1}^{2N} |\Gamma_y| \quad /4.4/$$

для  $\beta > \log 2/\epsilon$  и достаточно большом  $N/\log M$ .

Вследствие /4.3/ существует не более, чем

$$\begin{aligned} 2M \prod_{y=1}^{2N-1} (|\Gamma_y| + |\Gamma_{y+1}| + 1) &\leq 2M \prod_{y=1}^{2N-1} (1 + |\Gamma_y|)(1 + |\Gamma_{y+1}|) \leq \\ &\leq 2M \prod_{y=1}^{2N} (1 + |\Gamma_y|)^2 \end{aligned}$$

контуров с данным набором  $\Gamma_y$ . Мы получаем, что вероятность нетривиальной конфигурации ограничена сверху величиной

$$2M \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} (1+k)^2 [3e^{-\beta\epsilon}]^k \right\}^{2N} = 2M \left[ 3e^{-\beta\epsilon} \frac{4 - 9e^{-\beta\epsilon} + 9e^{-2\beta\epsilon}}{(1 - 3e^{-\beta\epsilon})^3} \right]^{2N}$$

которая стремится к нулю при  $N/\log M \rightarrow \infty$ , поскольку выражение в квадратных скобках меньше единицы при  $\beta\epsilon > c_2$ . В сочетании с /1/ последняя оценка дает требуемый результат.

Для доказательства /4.4/ мы используем тот факт, что число возможных расположений плохих вершин  $\Gamma_y$  на строке  $y$  не превосходит  $3^{|\Gamma_y|}$ . Нам остается оценить вероятность контура с данной конфигурацией вершин на нем, т.е. среднее вида  $\langle \prod_{y=1}^{2N} Q_y \rangle$ , где  $Q_y$  - характеристическая функция конфигураций вершин, принадлежащих  $\Gamma_y$ .

Согласно /1/ имеем

$$\langle \prod_{y=1}^{2N} Q_y \rangle_{\Lambda} \leq \prod_{y=1}^{2N} \langle [Q]_y \rangle_{\Lambda}^{1/2N}.$$

Неравенство /4.4/ выполняется при условии  $\langle [Q]_y \rangle_{\Lambda} \leq \exp(-2N\beta\epsilon |\Gamma_y|)$ . Для доказательства последнего неравенства в случае  $|\Gamma_y| \geq 2$  заметим, что наличие двух плохих вершин, находящихся рядом с хорошей вершиной, в результате последовательных отражений приводит к следующей ситуации у правого края периодической конфигурации  $[Q]_y$  /рис.4 а /.

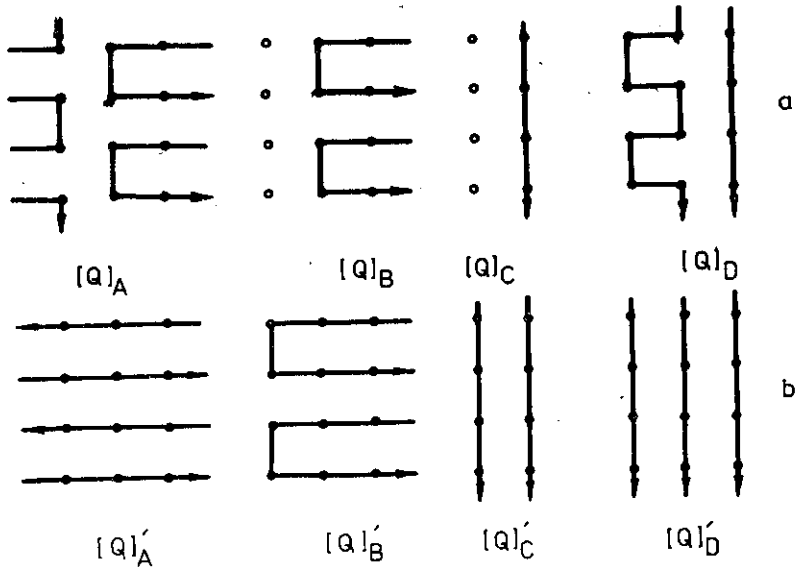


Рис.4

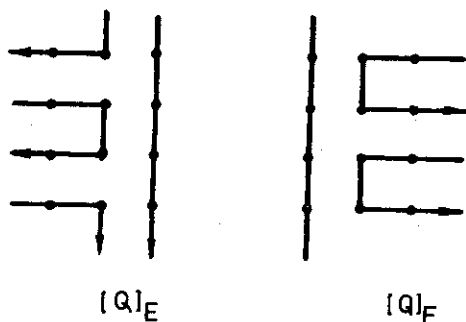


Рис.5

Во всех этих случаях мы можем заменить одну или две колонки плохих вершин на колонки хороших вершин, не меняя конфигурации окружающих вершин /рис.4 б/. Таким образом,

$$\langle [Q] \rangle_{\Lambda} \leq \langle [Q]' \rangle_{\Lambda} e^{-\beta n 2N \epsilon},$$

где  $n$  - число замененных колонок /  $n = 1$  для случаев В, С и  $n = 2$  для случаев А, D /.

В случае  $|\Gamma_y| = 1$   $\Gamma_y$  состоит из единственной вершины типа /5/ или одно-

го из типов /3/, /4/. Колонка вершин типа /5/, получающаяся в результате последовательных отражений, может быть заменена колонкой вершин типа /1/, и ее вероятность, таким образом, не превосходит  $\exp(-\beta 2N \epsilon)$ . Изолированные вершины типа /3/ и /4/ превращаются в колонки, изображенные на рис.5.

Рассмотрим колонку  $[Q]_E$ . Все стрелки слева принадлежат одному пути, поэтому можно представить сумму по конфигурациям в корреляторе  $\langle [Q]_E \rangle_{\Lambda}$  в виде частичных сумм по всем возможным вариантам этого пути. Путь однозначно представляется набором чисел  $\{k_1, \dots, k_N\}$ ,  $2 \leq k_i \leq 2M - 2$ , соответствующих числу шагов влево /вправо/ на строке  $2i(2i - 1)$ . Если  $k_i > k_{i-1}$  ( $k_i < k_{i-1}$ ), на строке  $2(i-1)$  /соответственно на строке  $2i - 1$  / обязательно находится последовательность  $|k_i - k_{i-1}|$  вершин типа /5/. В каждой строке слева от вертикального полимера имеется конфигурация  $R_y$  вершин, состоящая либо из прямолинейного участка пути с двумя поворотами, либо, дополнительно к ним, из  $|k_i - k_{i-1}|$  вершин типа /5/. Вероятность данного набора  $\{k_1, \dots, k_N\}$  меньше  $\langle \prod_{y=1}^{2N} R_y \rangle$ . Оценка /1/ для этого коррелятора дает

$$\langle \prod_{y=1}^{2N} R_y \rangle \leq \prod_{y=1}^{2N} \langle [R_y] \rangle^{1/2N},$$

и мы снова приходим к корреляционной функции периодической конфигурации. Заменяя, как и ранее, все вершины в полосе вершинами типа /1/, мы получим оценку

$$\langle [R_y] \rangle^{1/2N} \leq e^{-\beta n_y \epsilon},$$

где  $n_y$  - число указанных выше вершин в строке /2 или  $|k_i - k_{i-1}| + 2$  /. Таким образом, окончательно имеем

$$\langle [Q]_E \rangle \leq \sum_{k_1, \dots, k_N=2}^{2M-2} \exp\{-\beta\epsilon \sum_{i=2}^N (|k_i - k_{i-1}| + 4)\} \leq$$

$$\langle 2M \sum_{j_1, \dots, j_{N-1}=0}^{\infty} 2^N \exp\{-\beta\epsilon \sum_{i=2}^N (j_i + 4)\} = 4M \left[ \frac{2e^{-2\beta\epsilon}}{1 - e^{-\beta\epsilon}} \right]^{N-1} e^{2\beta\epsilon(1-N)},$$

где фактор  $2^N$  возник из-за существования различных возможностей выбрать знак перед  $(k_i - k_{i-1})$ . При  $\beta > \log 2/\epsilon$  и достаточно большом  $N/\log M$   $\langle [Q]_E \rangle \leq \exp(-2N\beta\epsilon)$ , что завершает доказательство.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как уже упоминалось в п.2, при  $a = 0$  рассмотренная нами модель решается точно. Решение обнаруживает логарифмическую особенность при значении активности  $z_c = e^{\beta\epsilon\mu} = 1/2$ . Эта особенность соответствует фазовому переходу из основного состояния, которое при  $\mu < 0$ ,  $0 \leq z < z_c$  представляет собой пустую решетку. Основное состояние отделено от возбужденных щелью  $2N\mu$ , поэтому появление хотя бы одного полимера на решетке сопровождается макроскопическим изменением энергии системы.

При  $\mu > 0$ ,  $a = 0$  точное решение не имеет особенностей. В этом случае основное состояние вырождено и представляет собой плотную упаковку полимеров. Отсутствие фазового перехода при  $a = 0$  означает, что истощение основного состояния происходит постепенно при увеличении температуры.

В нашей работе рассмотрен случай  $a > 0$ ,  $a + \mu > 0$ . При этом основное состояние становится плотной упаковкой прямолинейных полимеров, и ближайшее возбужденное состояние снова оказывается отделенным от основного макроскопической щелью. Именно это обстоятельство и является причиной фазового перехода, существование которого доказано в п.4. Отметим, что доказательство не опирается на факт вырождения основного состояния и справедливо для невырожденного основного состояния в случае некоторых граничных условий в направлении оси  $x$ .

Нетрудно убедиться в том, что включение внутримолекулярного взаимодействия  $a$  при  $a + \mu < 0$  сохраняет фазовый переход, проявляющийся в точном решении при  $a = 0$ . Таким образом, во

всей области значений  $a, \mu$  существует либо один, либо другой фазовый переход при высокой и при низкой плотности соответственно, за исключением области  $a < 0, \mu > 0$ , в которой наше доказательство существования фазового перехода не годится.

Мы благодарны В.А.Загребному и Г.Ненчу за полезные обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Gruber C., Kunz H. *Commun.Math.Phys.*, 1971, 22, p.133.
2. Heilmann O.J., Lieb E.H. *Commun.Math.Phys.*, 1972, 25, p.190.
3. Peierls R. *Proc. Cambridge Phil.Soc.*, 1936, 32, p.477.
4. Lebowitz J.L., Galavotti G.J. *Math.Phys.*, 1971, 12, p.1129.
5. Heilmann O.J. *Lett. Nuovo Cimento*, 1972, 3, p.95.
6. Runnels L.K., Freeres B.C. *Commun.Math.Phys.*, 1973, 32, p.191.
7. Fröhlich J. et al. *Commun.Math.Phys.*, 1978, 62, p.1.
8. Heilmann O.J., Lieb E.H. *J.Stat.Phys.*, 1979, 20, p.679.
9. Abraham D.B., Heilmann O.J. *J.Phys.(A)*, 1980, 13, p.1051.
10. Kasteleyn P.W. *J.Math.Phys.*, 1963, 4, p.287.

Рукопись поступила в издательский отдел  
25 ноября 1980 года.