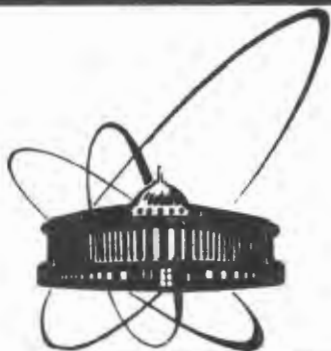


3/8-83



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

5131/83

P17-83-485

Е.И.Корнилов, В.Б.Приезжев

ОБОБЩЕННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ БЕТЕ
В РЕШЕТОЧНЫХ МОДЕЛЯХ
ДЛИННЫХ ПОЛИМЕРОВ

Направлено в журнал "Zeitschrift für Physik B"

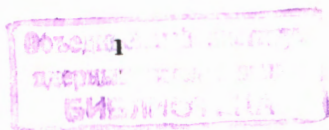
1983

I. Введение

В статистической механике полимеров, входящих в состав биомембраны, имеется важная проблема учета конфигурационных свойств длинных молекул, которая состоит в определении числа всех возможных способов размещения углеводородных цепочек в бислое без самопересечений и без точек соприкосновения молекул друг с другом. Большую роль в изучении этой проблемы сыграли двумерные решеточные модели Нейгла /1,2/, допускающие в термодинамическом пределе точное решение. В этих моделях близкоедействие отталкивание определялось как условие, чтобы через каждый узел решетки могла проходить не более одного раза полимерная цепочка. В последующих работах рассматривались обобщения моделей Нейгла путем введения более реалистических взаимодействий /3,4/, а также обобщение их на трехмерный случай /5,6/.

Модели Нейгла формулируются как эквивалентные модели димеров на декорированной решетке с заданными правилами соответствия между расположениями димеров и полимеров. В работе /5/ была предложена модель димеров, которая воспроизводит в трехмерном случае конфигурационные свойства моделей Нейгла. Авторы предприняли попытку доказать, что модель имеет фазовый переход со скачком теплоемкости в критической точке, причем теплоемкость остается конечной при $T \rightarrow T_c + 0$ и равной нулю при $T < T_c$. (Известно, что в двумерном случае эта величина расходится по закону $\sim (T - T_c)^{-1/2}$). Однако в работе /7/ была получена расходимость $C(T)$ по закону $-\ln(T - T_c)$ при $T \rightarrow T_c + 0$ для $d = 3$ и показано, что утверждение работы /5/ не является строгим.

В настоящей работе развивается новый метод расчета статсумм двумерных и трехмерных решеточных моделей полимеров. Метод основан



на использовании простого приема типа обобщенного приближения Бете и дает то же поведение теплоемкости, что и в работе /5/. Отличие состоит в том, что вместо приближения случайных фаз, используемого в /5/, мы имеем дело непосредственно с перечислением конфигураций случайных путей на решетке, что дает возможность придать нашему приближению ясный геометрический смысл. В частности, мы можем установить, что используемый нами метод дает точный результат при $d = 2$. Для $d = 3$ он является строгим при условии, что в системе имеется единственная полимерная цепочка (блок $n = 1$ в терминах статьи /7/). При наличии в системе двух и более цепочек между ними возникает взаимодействие, которое мы можем учесть, только переходя на обобщенную решетку Бете.

На протяжении всей работы мы будем иметь дело с идеальными полимерными цепочками на несжимаемой решетке, интересуясь лишь конфигурационными свойствами моделей. В работах /5,6/ показано, что поведение в окрестности критической точки, качественно согласующееся с экспериментально наблюдаемым, может быть получено без дополнительных математических трудностей путем введения в модель конечной концентрации молекул другого сорта (протеинов) с учетом сжимаемости решетки.

2. Полимеры и случайные блуждания

Рассмотрим простую кубическую решетку размером $N \times N \times N$, свернутую в тор для создания периодических граничных условий. Каждое ребро решетки снабдим стрелкой в направлении декартовых осей. отождествим полимер со случайным путем, начинающимся в точке \vec{r} , проходящим каждое ребро в направлении, указанном стрелкой, и возвращающимся в исходную точку после однократного обхода

тора. Очевидно, что при таком правиле обхода тора полимер не самопересекается. Потребуем также, чтобы в любой совокупности путей, начинающихся и заканчивающихся в точках $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n$, никакие пути не пересекались.

Пусть g — произвольная конфигурация замкнутых непересекающихся путей на решетке, каждый из которых охватывает тор только один раз. Определим статистический вес пути P , состоящего из $|P|$ шагов, как

$$W(P) = x^{|P|}. \quad (1)$$

Назовем величину

$$\chi(g) = \prod_{i=1}^n W(P_i) \quad (2)$$

весом конфигурации g , содержащей n замкнутых путей. Пустой решетке припишем вес 1.

Задача состоит в вычислении статсуммы

$$Z(x) = \sum_g \chi(g), \quad (3)$$

где суммирование производится по всем возможным конфигурациям на данной решетке. Наряду с определениями (1) и (2) введем вспомогательные функции

$$\bar{W}(P) = (-1)^{|P|} \quad (4)$$

и

$$\bar{\chi}(G) = \prod_{j=1}^n \bar{W}(P_j) \quad (5)$$

для произвольной конфигурации G замкнутых неперидических путей P_j , состоящих из $|P_j|$ шагов.

На путь P не накладывается условие однократного обхода

тора, поэтому в пути \mathcal{P} могут встречаться точки самопересечения. Отсутствие периодичности означает, что ни сам путь, ни один из его участков не могут быть представлены в виде $(\mathcal{P}')^m$, где \mathcal{P}' — замкнутый путь меньшей длины, а $m > 1$ — целое.

Имеет место следующая теорема.

Т е о р е м а

Произведение

$$\prod_{\mathcal{P}} (1 + \bar{W}(\mathcal{P})) \quad (6)$$

по всем возможным замкнутым непериодическим путям на решетке с ориентированными ребрами равно сумме $\sum_{\mathcal{G}} \bar{\chi}(\mathcal{G})$ по всем конфигурациям замкнутых непересекающихся путей, включая пустую решетку:

$$\prod_{\mathcal{P}} (1 + \bar{W}(\mathcal{P})) = \sum_{\mathcal{G}} \bar{\chi}(\mathcal{G}). \quad (7)$$

Полное доказательство этой теоремы в более общей формулировке приведено в работе /8/. Здесь мы ограничимся простым примером, поясняющим результат теоремы. Каждому члену в разложении (6) можно сопоставить конфигурацию путей на решетке и наоборот. Рассмотрим простейшую конфигурацию с пересечением в одной точке (рис.1). Ее можно представить как два пути: $p_1 = aa'$ и $p_2 = bb'$, пересекающиеся в точке c , а также как единственный самопересекающийся путь $ab'ba'$ (напомним, что в силу периодических граничных условий точки a и a' , b и b' эквивалентны). В разложении произведения (6) первой ситуации соответствует член $(-1)^{|p_1|} (-1)^{|p_2|}$, а второму — член $(-1)^{|p_1| + |p_2|}$. Таким образом, вклады от пересекающихся и самопересекающихся путей сокращаются, и в разложении остаются только члены, соответствующие всем слагаемым суммы $\sum_{\mathcal{G}} \bar{\chi}(\mathcal{G})$.

Равенство (7) дает возможность переформулировать проблему перечисления всех расположений непересекающихся полимеров как более простую задачу о случайном блуждании единственной частицы по кубической решетке с заданными правилами прохождения ориентированных ребер.

Для выполнения этой программы нам нужно установить связь между весом конфигурации $\chi(g)$ и функцией $\bar{\chi}(\mathcal{G})$. Начнем с более простого двумерного случая.

При $d = 2$ блуждание происходит на двумерной поверхности тора, поэтому любой путь, охватывающий тор более одного раза, обязательно самопересекается. Следовательно, в сумме $\sum_{\mathcal{G}} \bar{\chi}(\mathcal{G})$ остаются пути, охватывающие тор только один раз и, значит, состоящие из одинакового числа шагов L . Поэтому простая замена переменных $\bar{\chi} \rightarrow \chi e^{i\pi/L}$ приводит к перемене знака в каждом замкнутом пути. Тогда $\sum_{\mathcal{G}} \bar{\chi}(\mathcal{G}) \rightarrow \sum_g \chi(g)$, а поскольку мы предполагаем $L \rightarrow \infty$ вместе с $N \rightarrow \infty$, в термодинамическом пределе $Z(x)$ и $Z(\bar{\chi})$ совпадают.

Таким образом, для $d = 2$ мы можем записать статсумму в виде

$$Z(x) = \sum_{\mathcal{G}} \bar{\chi}(\mathcal{G}) = \prod_{\mathcal{P}} (1 + \bar{W}(\mathcal{P})). \quad (8)$$

Для логарифма статсуммы получаем выражение

$$\begin{aligned} \ln Z(x) &= \sum_{\mathcal{P}} \ln(1 + \bar{W}(\mathcal{P})) = \sum_{\mathcal{P}} \ln(1 - (-\bar{W}(\mathcal{P}))) = \\ &= - \sum_{\mathcal{P}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-\bar{W}(\mathcal{P}))^j}{j} = -N^2 \sum_{t=1}^{\infty} \frac{S_t(0) x^t}{t}, \end{aligned} \quad (9)$$

где $S_t(0)$ — число всех возможных замкнутых путей длины t , начинающихся и заканчивающихся в начале координат и не ограни-

ченных условием периодичности. (Заметим, что фактически суммирование в (9) начинается с $t=L$). Последняя сумма в равенстве (9) умножена на N^2 , так как любая из N^2 точек решетки может быть выбрана за начало пути. Знаменатель t возник из-за того, что замкнутый путь длины t может иметь любой из содержащихся в нем узлов в качестве исходного.

Прежде чем переходить к расчету суммы в выражении (9), обсудим случай $d=3$. В трехмерном случае сумма $\sum_{G \in \Gamma} \chi(G)$ содержит вклад от путей, охватывающих гипертор более одного раза, так как эти пути не обязательно самопересекаются. Поэтому замена переменных $\tilde{\chi} \rightarrow \chi e^{i\pi/4}$ не дает соответствия между правой частью равенства (7) и статсуммой (3).

Для восстановления этого соответствия мы должны пренебречь всеми путями, охватывающими тор более одного раза. Такое приближение эквивалентно двумерному обобщению приближения Бете. Действительно, проведем через каждый узел решетки плоскость, перпендикулярную вектору $(1,1,1)$, и пронумеруем полученные плоскости в порядке удаления от начала координат в положительном направлении. Случайное блуждание по трехмерной решетке мы можем представить теперь как блуждание в плоскости, считая номер плоскости координатой времени. Если теперь перейти от данной двумерной решетки к решетке Бете, то мы получим требуемое условие, что любой путь, охватывающий тор более одного раза, является самопересекающимся. Возникающая при этом топология случайного блуждания иллюстрируется на рис.2 (см., например, /9/).

Принимая указанное приближение, мы имеем для статсуммы равенство (8) и, следовательно, (9) не только в двумерном, но и в трехмерном случае.

3. Вычисление статсуммы

Перейдем теперь к расчету последней суммы в равенстве (9). Вычисления произведем для $d=3$; двумерный аналог этого расчета выполняется элементарно.

Пусть $P_{\vec{r}}(t)$ - путь из начальной точки \vec{r}_0 в точку \vec{r} с координатами (r_1, r_2, r_3) за t шагов. Определим сумму

$$f(\vec{r}; t) = \sum_{P_{\vec{r}}(t)} x^t,$$

где суммирование проводится по всем возможным путям $P_{\vec{r}}(t)$ без ограничений на периодичность и самопересечение. Очевидно, что

$$\sum_t (0) x^t = f(\vec{r}_0; t). \quad (10)$$

Функция $f(\vec{r}; t)$ удовлетворяет следующему рекуррентному соотношению:

$$f(r_1, r_2, r_3; t) = x f(r_1-1, r_2, r_3; t-1) + x f(r_1, r_2-1, r_3; t-1) + x f(r_1, r_2, r_3-1; t-1), \quad (11)$$

которое с помощью матрицы перехода $\Lambda(\vec{r}; \vec{r}')$ можно записать в виде

$$f(\vec{r}; t) = \sum_{\vec{r}'} \Lambda(\vec{r}; \vec{r}') f(\vec{r}'; t).$$

Для принятых нами периодических граничных условий матрица перехода диагонализуеться с помощью преобразования Фурье в представлении

$$f(\vec{a}; t) = \sum_{r_1, r_2, r_3=0}^N e^{-\frac{2\pi i}{N}(\vec{r}\vec{a})} f(\vec{r}; t),$$

в котором ее диагональные элементы имеют вид

$$\lambda(a_1, a_2, a_3) = x e^{\frac{2\pi i}{N} a_1} + x e^{\frac{2\pi i}{N} a_2} + x e^{\frac{2\pi i}{N} a_3} \quad (I2)$$

Для суммы по всем замкнутым путям длины t получим

$$N^3 S_t(x) = \sum_{\vec{r}_0} f(\vec{r}_0; t) = \text{Sp} \Lambda^t = \sum_{a_1, a_2, a_3=1}^N \lambda^{t(a_1, a_2, a_3)} \quad (I3)$$

С учетом равенств (9) и (I3) мы можем представить статсумму (3) в виде

$$\ln Z(x) = \sum_{t=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{t} \sum_{a_1, a_2, a_3=1}^N \lambda^{t(a_1, a_2, a_3)} \right), \quad (I4)$$

и, поскольку

$$-\sum_{t=1}^{\infty} \frac{\lambda^{t(a_1, a_2, a_3)}}{t} = \ln(1 - \lambda(a_1, a_2, a_3)),$$

имеем

$$\ln Z(x) = \sum_{a_1, a_2, a_3=1}^N \ln(1 - x e^{i \frac{2\pi}{N} a_1} - x e^{i \frac{2\pi}{N} a_2} - x e^{i \frac{2\pi}{N} a_3}) \quad (I5)$$

Переходя в последнем выражении от суммирования к интегрированию, т.е. полагая $\alpha = \frac{2\pi}{N} a_1$, $\beta = \frac{2\pi}{N} a_2$, $\gamma = \frac{2\pi}{N} a_3$ и $d\alpha = d\beta = d\gamma = \frac{2\pi}{N}$,

получим в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$ окончательное выражение для статсуммы трехмерной модели непересекающихся полимеров:

$$Z(x) = \exp \left\{ \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_0^{2\pi} \ln(1 - x e^{i\alpha} - x e^{i\beta} - x e^{i\gamma}) d\alpha d\beta d\gamma \right\} \quad (I6)$$

Согласно замечаниям в разделе 2 аналогичное выражение для двумерной модели на квадратной решетке оказывается точным:

$$Z(x) = \exp \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \ln(1 - x e^{i\alpha} - x e^{i\beta}) d\alpha d\beta \right\}. \quad (I7)$$

Распространение полученных результатов на случай более сложных решеток не встречает никаких принципиальных затруднений.

Рассмотрим, например, кубическую решетку, у которой в каждой элементарной ячейке проведена диагональ, ориентированная в направлении вектора (1,1,1). Как и в первой модели, случайный путь, изображающий полимер, проходит каждое ребро в направлении его ориентации. По-прежнему будем считать, что звено полимера, расположенное вдоль декартовых осей, имеет статистический вес X ; каждому ребру на диагонали элементарного куба припишем вес Y . Для этой модели рекуррентные соотношения (II) принимают вид

$$f(r_1, r_2, r_3; t) = x f(r_1-1, r_2, r_3; t-1) + x f(r_1, r_2-1, r_3; t-1) + x f(r_1, r_2, r_3-1; t-1) + y f(r_1-1, r_2-1, r_3-1; t-1). \quad (I8)$$

Соответственно изменяются и диагональные элементы матрицы перехода:

$$\lambda(a_1, a_2, a_3) = x e^{\frac{2\pi i}{N} a_1} + x e^{\frac{2\pi i}{N} a_2} + x e^{\frac{2\pi i}{N} a_3} + y e^{\frac{2\pi i}{N} (a_1 + a_2 + a_3)} \quad (I9)$$

что приводит с помощью таких же рассуждений, как и в предыдущем случае, к выражению для статсуммы:

$$Z(x, y) = \exp \left\{ \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_0^{2\pi} \ln(1 - x e^{i\alpha} - x e^{i\beta} - x e^{i\gamma} - y e^{i(\alpha+\beta+\gamma)}) d\alpha d\beta d\gamma \right\}. \quad (20)$$

Двумерный аналог этого выражения имеет вид

$$Z(x, y) = \exp \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \ln(1 - x e^{i\alpha} - x e^{i\beta} - y e^{i(\alpha+\beta)}) d\alpha d\beta \right\}, \quad (21)$$

и, подобно формуле (I7), является точным результатом для задачи

о непересекающихся полимерах на треугольной решетке с ориентированными ребрами.

Вывод выражения для статсуммы во второй модели требует некоторых пояснений. Если в первой модели все замкнутые пути, однократно охватывающие тор, имеют фиксированное число шагов L , то во второй модели это число меняется в зависимости от числа пройденных диагоналей элементарного куба. (Один шаг вдоль диагонали эквивалентен трем шагам вдоль декартовых осей). Для установления соответствия между статсуммой $Z(x, y)$ и суммой $\sum_{\tilde{G}} \tilde{\Gamma}(\tilde{G})$ мы должны представить обе величины в виде сумм по ансамблям с набором $\{n_1, \dots, n_k\}$ обходов тора, каждый из которых содержит данное число шагов $L_1 = L, L_2 = L-2, \dots, L_i = L-2(i-1), \dots, L_k = \frac{L}{3}$, и произвести замену переменных X, y в каждом ансамбле. Поскольку все $L_i \rightarrow \infty$ при $N \rightarrow \infty$, мы снова получаем, что статсумма с преобразованными переменными $Z(\tilde{x}, \tilde{y})$ переходит в $Z(x, y)$.

4. Анализ статсуммы

Выражения (16) и (17) являются частными случаями (20) и (21) при $y = 0$. Для наглядности приведем полный анализ последней статсуммы.

Проинтегрируем по одной переменной в выражении для логарифма статсуммы (21). Применяя формулу Йенсена, получим

$$\ln Z_2(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{|a|>1} \ln |1 - x e^{ia}| da + \frac{1}{2\pi} \int_{|a|<1} \ln |x + y e^{ia}| da, \quad (22)$$

где $a = \frac{1 - x e^{ia}}{x + y e^{ia}}$. (23)

Неравенство $|a| < 1$ сводится к неравенству

$$\cos \alpha > \frac{1-y}{2x} \quad \text{для } \alpha \in [0, 2\pi], \quad (24)$$

которое определяет пределы интегрирования в (22).

Рассмотрим два случая: А - когда неравенство (24) выполняется для всех α , и В - когда для всех α выполняется противоположное неравенство. Случай А имеет место для x и y , удовлетворяющих условию

$$y > 1 + 2x. \quad (25)$$

При этом в (22) остается только второй интеграл, и повторное применение формулы Йенсена дает

$$\ln Z_2(x, y) = \ln y. \quad (26)$$

В случае В при $y < 1 - 2x$

$$\ln Z_2(x, y) = 0, \quad (27)$$

так как оба интеграла равны нулю в рассматриваемой области.

Фазовая диаграмма представлена на рис.3.

Определим тип особенности на границе раздела фаз. Раскладывая подлогарифмическое выражение по малому $\tau = 2x + 1 - y$, при переходе из А в С имеем

$$\begin{aligned} \ln Z_2(x, y) &= \ln y - \frac{1}{2\pi} \int_{\arccos \frac{1-y}{2x}}^{\pi} \ln \left| \frac{x^2 + 2xy \cos \alpha + y^2}{1 - 2x \cos \alpha + x^2} \right| d\alpha \approx \\ &\approx \ln y - c \int_0^{\sqrt{\tau}} \ln(1 + c_1 \alpha^2) d\alpha \approx \ln y - c_2 \tau^{3/2}. \end{aligned} \quad (28)$$

Аналогичный результат получается и для перехода из В в С. Закон "3/2" и есть известный результат Нейгла для двумерных решеточных моделей полимеров.

В трехмерном случае все рассуждения аналогичны приведенным выше. Сначала интегрируем (20) по γ . Получим

$$\ln Z_3(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{|b|>1} \left\{ \ln |1 - x e^{i\alpha} - x e^{i\beta}| d\alpha d\beta + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{|b|<1} \ln |x + y e^{i(\alpha+\beta)}| d\alpha d\beta \right\} \quad (29)$$

где
$$b = \frac{1 - x e^{i\alpha} - x e^{i\beta}}{x + y e^{i(\alpha+\beta)}}. \quad (30)$$

Определение пределов интегрирования в (29) сводится к разрешению тригонометрических неравенств

$$F(x, y; \alpha, \beta) \equiv 1 - 4x \cos \frac{\alpha+\beta}{2} \cos \frac{\alpha-\beta}{2} + 4x^2 \cos^2 \frac{\alpha-\beta}{2} - x^2 - y^2 - 2xy \cos(\alpha+\beta) \begin{cases} < 0, \\ > 0. \end{cases} \quad (31a)$$

Потребуем, чтобы

$$\max_{\alpha, \beta} F(x, y; \alpha, \beta) < 0 \quad (32a)$$

и

$$\min_{\alpha, \beta} F(x, y; \alpha, \beta) > 0. \quad (32b)$$

Тогда при выполнении (32a) в (29) остается только второй интеграл с пределами интегрирования от 0 до 2π , что позволяет легко его вычислить. Пользуясь неравенством (32a), получаем

$$\ln Z_3(x, y) = \ln y \quad (33)$$

в области $A = \{y > 1, x < (y - y^{-1})/3\}$.

А из (32b) следует, что

$$\ln Z_3(x, y) = 0 \quad (34)$$

в области $B = \{y < 1 - 3x, 0 < x < 1/3\}$.

Фазовая диаграмма представлена на рис.3.

Введем переменные $v = \frac{\alpha-\beta}{2}$, $z = \frac{\alpha+\beta}{2}$ и рассмотрим их значения, при которых реализуются $\max_{\alpha, \beta} F$ или $\min_{\alpha, \beta} F$. Для определения вида особенности при переходе А - С разложим статсумму по малому параметру $\tau = x - (y - y^{-1})/3$ и косинусы в подлогарифмическом выражении вблизи $v_{\max} = 0$, $z_{\max} = \arccos(-\frac{1}{2y})$.

Имеем

$$\begin{aligned} \ln Z_3(x, y) &\approx \ln y - c \int \int \ln |1 + c_1 \alpha^2 + c_2 \beta^2| d\alpha d\beta \approx \\ &\approx \ln y - c_3 \tau^2. \end{aligned} \quad (35)$$

Аналогично при переходе В - С, раскладывая статсумму по $\tau' = x - (1 - y)/3$ и косинусы вблизи $v_{\min} = z_{\min} = 0$, имеем

$$\ln Z_3(x, y) \approx -c_4 \tau'^2. \quad (36)$$

Таким образом, теплоемкость обеих наших трехмерных моделей испытывает скачок в критической точке.

5. Обсуждение

Придавая переменным x, y статистический смысл, т.е. полагая

$$x = e^{-\beta \mu_x}, y = e^{-\beta \mu_y}, \quad (37)$$

где β - обратная температура, а μ_x, μ_y - химические потенциалы соответствующих звеньев случайного пути, мы видим, что

непосредственной моделью фазового перехода в биомембране может служить только переход из области А в С как в двумерном, так и в трехмерном случае. Действительно, при $\mu_x > 0$ и $\mu_y < 0$ ($x < 1$, $y > 1$) основным состоянием модели является плотноупакованная решетка, в которой все полимеры расположены по диагоналям элементарных кубов. При переходе из области А в С происходит разупорядочение этого состояния. Критическая температура однозначно определяется соотношениями (37) и уравнением $y - y^{-1} = 3x$ для заданных μ_x и μ_y .

В области $\mu_x > 0$, $\mu_y > 0$ ($x < 1$, $y < 1$) основное состояние соответствует пустой решетке, и при фазовом переходе из В в С происходит ее заполнение. Поэтому при сопоставлении наших моделей с моделями биомембран в этой области мы должны были бы прибегнуть к тому же приему, что и в работе /5/, а именно: связывать со случайными блужданиями не саму полимерную цепочку, а дислокацию, возникающую при отклонении состояния системы от основного.

Для обеих моделей, рассмотренных нами, термодинамические свойства системы останутся такими же, т.е. при фазовом переходе имеется корневая особенность теплоемкости в двумерном случае и скачок теплоемкости в трехмерном. Учитывая аргументы статьи /7/, естественно предположить, что даже простейший выход за рамки приближения Бете должен дать расходимость $C(T)$ в трехмерном случае.

Заметим, наконец, что в области $\mu_x < 0$, $\mu_y > 0$ ($x > 1$, $y < 1$) основное состояние, в котором все полимеры расположены на ребрах элементарных кубов, является сильно вырожденным и этим объясняется отсутствие фазового перехода в указанной области.

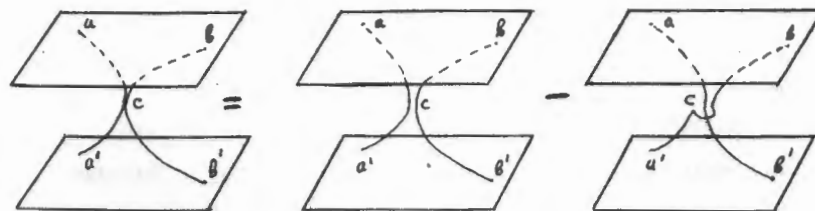


Рис. I

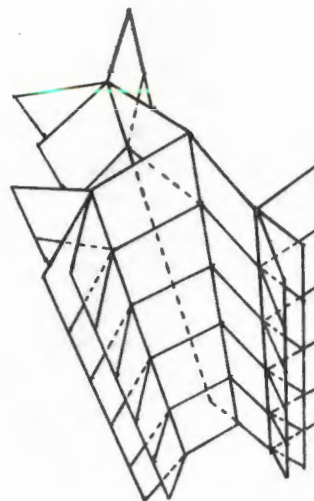


Рис.2

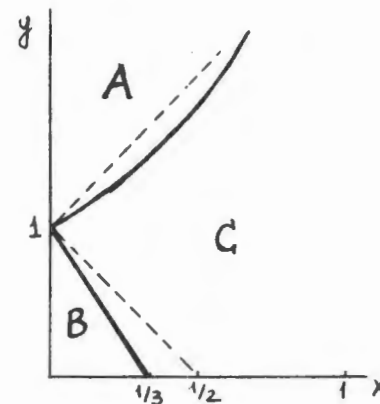


Рис.3

Л и т е р а т у р а

1. Nagle J.F. J.Chem.Phys., 1973, 58, No.1, 252-264.
2. Nagle J.F. Proc. Roy.Soc.Lond., 1974, A337, 569-589.
3. Ангелеску П., Приезжев В.Б. ТМФ, 1982, 52, № 3, 453-462.
4. Wiegel F.W. J. Stat.Phys., 1975, 13, No.6, 515-530.
5. Izuuama T., Akutsu Y. J.Phys.Soc.Jpn., 1982, 51, No.1, 50-58; J.Phys.Soc.Jpn., 1982, 51, No.3, 730-740.
6. Izuuama T. J.Phys.Soc.Jpn., 1982, 51, No.11, 3449-3461.
7. Bhattacharjee S.M., Nagle J.F., Huse D.A., Fisher M.E.
Carnegie-Mellon University, Preprint.
8. Приезжев В.Б. ТМФ, 1977, 31, № I, 89-100.
9. Maritan A., Stella A.L. J.Phys. A.: Math.Gen., 1983, 16, L157-L162.

Рукопись поступила в издательский отдел
8 июля 1983 года.

Корнилов Е.И., Приезжев В.Б.

P17-83-485

Обобщенное приближение Бете
в решеточных моделях длинных полимеров

Проведено исследование критического поведения решеточной модели самоизбегающих полимеров в трехмерном случае. Эта модель актуальна для биофизики, поскольку ее свойства близки к термодинамическим свойствам полимеров биомембраны. Предложен новый метод вычисления статсумм, который в двумерном случае дает точную расходимость теплоемкости в T_c . В трехмерном случае наш метод позволяет получить конечную величину для c в T_c и выявить те отброшенные конфигурации, которые определяют такое поведение модели.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Kornilov E.I., Priezzhev V.B.

P17-83-485

Generalized Bethe Approximation
in Lattice Models of Long Polymers

The phase transition behaviour of self-avoiding polymer model on a three-dimensional lattice is studied. This model is of biological interest because of its relevance to the thermodynamic properties of a lipid bilayer. An approximate procedure is proposed which gives the exact divergence of the specific heat above T_c for the two-dimensional case. In three-dimensions our method predicts a finite value for c at T_c and demonstrates clearly what neglected contributions to the partition function lead to such a behaviour of the model.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1983