

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P17-86-168

Е.И.Корнилов, В.Б.Приезжев

ТЕОРЕМА КИРХГОФА
В МОДЕЛИ
КОРНЕВЫХ РАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИМЕРОВ

Направлено в журнал "Теоретическая
и математическая физика"

1986

Введение

В последние годы три группы решеточных моделей обсуждаются в тесной связи друг с другом. Это модели перколяции, сформулированные в 1957 г. в работе Бродбента и Хаммерсли ^{/1/}, классические проблемы перечисления решеточных фигур ^{/2/} и модель разветвленных полимеров ^{/3/}. Значительные успехи в изучении этих моделей связаны, в первую очередь, с использованием метода разложений, основанного на прямом перечислении кластеров из последовательно возрастающего числа элементов решетки. Метод разложений и машинное моделирование позволили понять многие закономерности роста кластеров с заданными свойствами, однако число строгих результатов в этой области очень ограничено. Данная статья посвящена изучению одной точно решаемой модели разветвленных полимеров, которая была названа моделью корневых полимеров ^{/4/}.

На языке теории графов разветвленный полимер представляет собой дерево. Если вершины графа совпадают с узлами решетки, а его ребра - с ребрами решетки, то такой граф является решеточной моделью разветвленных полимеров. Эта модель пригодна ^{/5/} для описания предельных углеводородов, так как правильно моделирует углы между связями и эффекты исключенного объема. Как правило, рассматривается сильно разбавленный раствор, когда полимеры не взаимодействуют друг с другом и задача в этом случае состоит в определении числа конфигураций изолированного полимера при заданном числе прореагировавших мономеров. В другой, физически более интересной постановке, рассматривается ансамбль полимеров в данном объеме. Узлы, свободные от полимера, считаются занятыми мономерами. Такая мономер-полимерная модель весьма сложна ^{/4/} и не имеет пока удовлетворительного описания. Однако оказалось ^{/4/}, что достаточно в каждом разветвленном полимере выделить одну вершину, пометив ее произвольным образом, чтобы задача стала точно решаемой. В работе ^{/4/} было показано, как модель помеченных или корневых деревьев связана с ациклической моделью, решенной в ^{/6/}. В § I данной статьи показано, что решение модели корневых деревьев может быть получено с помощью теоремы Кирхгофа ^{/7/}, применявшейся ранее ^{/8/} к перечислению плотноупакованных деревьев с нулевой плотностью мономеров. В § 2 исследуется термодинамика модели для произвольной размерности пространства. В § 3 разрабатывается матричный аппарат для вычисления корреляционных функций и вычисляются

ся простейшие корреляторы - среднее число атомов полимера с данной валентностью.

§ I. Корневые деревья на решетке

В дальнейшем изложении используются следующие понятия теории графов. Дерево - связанный непустой граф, не имеющий циклов среди своих подграфов. Дерево на решетке - это подграф решетки, который есть дерево. Корневое дерево - дерево с одной выделенной вершиной. Изолированная вершина, по определению, также считается корневым деревом. Остовное дерево - дерево, содержащее все узлы графа. Для того, чтобы различать ребра решетки и дерева, последние будем называть звеньями.

Рассмотрим произвольную целочисленную решетку \mathcal{L} , состоящую из \mathcal{N} узлов. Обозначим через V - множество узлов решетки и через E - множество ребер. Наложим периодические граничные условия. Задача состоит в вычислении производящей функции (ПФ) корневых деревьев.

$$Z_{\mathcal{N}}(z, x) = \sum_{N_z + N_x = \mathcal{N}} G(N_z, N_x) z^{N_z} x^{N_x} \quad (I)$$

где $G(N_z, N_x)$ - число различных покрытий решетки N_z корневыми деревьями с общим числом звеньев N_x . Переменным x и z можно придать статистический смысл, полагая $x = e^{-\beta \mu_x}$, $z = e^{-\beta \mu_z}$, где β - обратная температура, μ_x - химпотенциал звена полимера, μ_z - химпотенциал корня дерева.

Модель корневых деревьев изоморфна модели остовных деревьев на той же решетке с одним дополнительным узлом ν_0 , связанным ребрами со всеми остальными узлами. Введение дополнительного узла в решетку используется ^{/9/} в теории перколяции для выключения "внешнего поля". Установившееся название этого узла в литературе ^{/10/} "демон" (ghost), которое и будет использоваться в дальнейшем. Для доказательства изоморфизма рассмотрим произвольную конфигурацию корневых деревьев на \mathcal{L} . Построим остовное дерево на решетке с демоном по такому правилу: отождествим со звеньями остовного дерева: 1) звенья деревьев на \mathcal{L} 2) ребра, соединяющие корни деревьев с демоном. Тогда каждый узел решетки будет принадлежать единственному дереву. Действительно, все деревья на решетке связаны с демоном через свои корни, а момеры также являются корневыми деревьями и тоже связаны с демоном. Поэтому построенный граф покрывает все точки решетки, т.е. является остовным. Циклы в этом графе отсутствуют потому, что их нет на основной решетке по определению, а демон связан с каждым деревом единственной связью. Фрагмент квадратной решетки с демоном, иллюстрирующий это построение, представлен на рис. I.

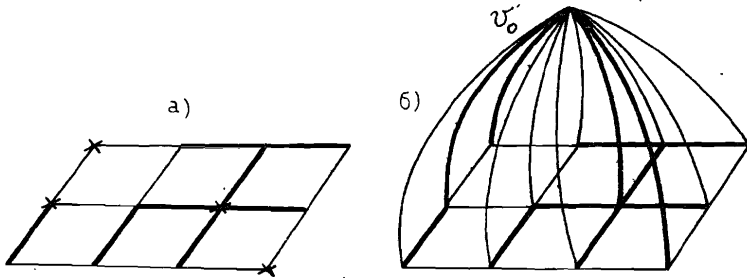


Рис.1. Соответствие между системой корневых разветвленных полимеров на квадратной решетке (а) и остовным деревом на решетке с демоном. Крестиками помечены корни полимеров.

Из полученного соответствия следует, что ПФ остовных деревьев на решетке с демоном будет определяться выражением (I), где N_x означает число звеньев остовного дерева, принадлежащих \mathcal{Z} и имеющих вес x , а N_z - число звеньев, инцидентных демону и имеющих вес z . Для вычисления ПФ остовных деревьев служит матричная теорема о деревьях Кирхгофа [17]. Составим матрицу M размера $(N+1) \times (N+1)$ по следующему правилу (v_i обозначает узел с номером i , q - координационное число решетки):

$$M_{ij} = \begin{cases} N_z & , \text{ если } i=j=0 \\ z+qx & , \text{ если } i=j \neq 0 \\ -x & , \text{ если } v_i \neq v_j \text{ соединены ребром,} \\ -z & , \text{ если } i=0, j \neq 0 \text{ либо } j=0, \\ & i \neq 0, \\ 0 & , \text{ во всех остальных случаях.} \end{cases}$$

Теорема. Все алгебраические дополнения A_{ij} матрицы M равны друг другу и их общее значение есть ПФ числа остовных деревьев на решетке с демоном.

Доказательство приведено в книге Ф. Харари [11], стр. 181.

Структура матрицы M проста: диагональные элементы равны сумме весов, инцидентных данному узлу ребер, недиагональные элементы фиксируют геометрию решетки.

Проще всего вычислить алгебраическое дополнение A_{00} , так как задача в этом случае сводится к вычислению определителя размерности N от циклической матрицы, обозначаемой в дальнейшем Λ .

Покажем на примере простой квадратной решетки размером $l_1 \times l_2$, как производится это вычисление. Поскольку нумерация узлов в теореме Кирхгофа выбирается произвольно, будем для этой цели пользоваться декартовыми координатами. Матрица Λ выглядит следующим образом:

$$\begin{matrix} & \dots & (i-1, j) & \dots & (i, j) & (i, j+1) & \dots & (i+1, j) & \dots \\ (i-1, j) & \dots & z+4x & \dots & 0 & -x & 0 & \dots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (i, j-1) & \dots & 0 & \dots & z+4x & -x & 0 & \dots & 0 & \dots \\ (i, j) & \dots & -x & \dots & -x & z+4x & -x & \dots & -x & \dots \\ (i, j+1) & \dots & 0 & \dots & 0 & -x & z+4x & \dots & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (i+1, j) & \dots & 0 & \dots & 0 & -x & 0 & \dots & z+4x & \dots \end{matrix}$$

Ввиду наложенных на решетку периодических граничных условий выполняются условия цикличности $\Lambda(\vec{k}, \vec{m}) = \Lambda(\vec{k} + \vec{m})$ и $\Lambda(\vec{k} + \vec{e}) = \Lambda(\vec{k})$, где $\vec{k} = (k_1, k_2)$, $\vec{m} = (m_1, m_2)$ - декартовы координаты узлов решетки, $\vec{e} = (e_1, e_2)$.

Рассмотрим матрицу $R(\vec{n}, \vec{m}) = (l_1 l_2)^{-1/2} \exp\{2\pi i (\frac{n_1 m_1}{l_1} + \frac{n_2 m_2}{l_2})\}$. Тогда [12] матрица

$$B = R^{-1} \Lambda R \quad (2)$$

будет диагональной с матричными элементами

$$B(\vec{m}, \vec{n}) = \delta_{m_1 n_1} \delta_{m_2 n_2} \lambda \left(\frac{2\pi m_1}{l_1}, \frac{2\pi m_2}{l_2} \right) = \delta_{m_1 n_1} \delta_{m_2 n_2} \lambda_{m_1 m_2},$$

$$\text{где } \lambda(\varphi_1, \varphi_2) = \sum_{\vec{k}} \Lambda(\vec{k}) e^{i\vec{\varphi}\vec{k}}$$

Отсюда

$$\det \Lambda = \det B = \prod_{n_1=1}^{l_1} \prod_{n_2=1}^{l_2} \left(z+4x - 2x \cos \frac{2\pi n_1}{l_1} - 2x \cos \frac{2\pi n_2}{l_2} \right).$$

В термодинамическом пределе $l_1, l_2 \rightarrow \infty$ свободная энергия на узел решетки равна

$$\frac{f}{kT} = \ln \tilde{Z}_{kb} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \tilde{Z}_N = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln(z+4x - 2x \cos \alpha - 2x \cos \beta) d\alpha d\beta. \quad (3)$$

Аналогичный расчет для других типов решеток дает следующие выражения:

$$d = 1: \quad \ln Z_{\text{лин}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln(z + 2x - 2x \cos \alpha) d\alpha, \quad (4)$$

$$d = 2, \text{ треугольная:} \quad \ln Z_{\text{тр}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \ln(z + 6x - 2x \cos \alpha - 2x \cos \beta - 2x \cos(\alpha + \beta)) d\alpha d\beta, \quad (5)$$

гексагональная:

$$\ln Z_{\text{г}} = \frac{1}{2} \ln Z_{\text{тр}}, \quad (6)$$

$d = 3$, кубическая,

$$\ln Z_{\text{куб}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_0^{2\pi} \ln(z + 6x - 2x \cos \alpha - 2x \cos \beta - 2x \cos \gamma) d\alpha d\beta d\gamma, \quad (7)$$

гранецентрированная:

$$\ln Z_{\text{гцк}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_0^{2\pi} \ln(z + 12x - 4x(\cos \alpha \cos \beta + \cos \alpha \cos \gamma + \cos \beta \cos \gamma)) d\alpha d\beta d\gamma, \quad (8)$$

объемноцентрированная:

$$\ln Z_{\text{оцк}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_0^{2\pi} \ln(z + 8x - 8x \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma) d\alpha d\beta d\gamma, \quad (9)$$

$d \geq 4$, гиперкубическая:

$$\ln Z = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \ln(z + 2x \sum_{i=1}^d (1 - \cos \alpha_i)) d\alpha_1 \dots d\alpha_d. \quad (10)$$

Приведем также выражение для статсуммы этой модели на решетке Бете с координационным числом q , которое можно получить непосредственно из одномерного решения

$$\ln Z_{\text{Б}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln(z + qx - xe^{i\alpha} - x(q-1)e^{-i\alpha}) d\alpha. \quad (11)$$

§ 2. Анализ статистических сумм

Подлогарифмические выражения в (3-11) не обращаются в ноль при положительных z и x , поэтому нетривиального фазового перехода в модели корневых полимеров нет. Однако представляет интерес значе-

ние показателя λ в законе асимптотического стремления системы к плотной упаковке

$$\lim_{z/x \rightarrow 0} (1 - \rho_x) \sim \left(\frac{z}{x}\right)^\lambda, \quad (12)$$

где $\rho_x = x \frac{\partial \ln Z}{\partial x}$ - плотность полимерных звеньев. Выбор переменной в законе (12) требует некоторого пояснения. Дело в том, что веса x и z не являются независимыми, так как они связаны уравнением $\rho_x + \rho_z = 1$. Поэтому физическим смыслом обладает лишь отношение z/x .

Заметим, что в простейшем случае одинаковых деревьев с единственным звеном, мономер-полимерная проблема сводится к задаче о мономерах и димерах. Гаунт [13] исследовал ряды по малой плотности димеров для различных решеток и обнаружил неуниверсальность показателя λ в аналогичном законе. Эта величина зависела от типа решетки. Для плотноупакующихся решеток (треугольной, гранецентрированной) значение λ совпадало с классическим - вычисленным для решетки Бете с тем же координационным числом. Но для неплотноупакующихся (квадратной, гексагональной) - отличалось от него.

В нашем случае при $d = 1$ интегрирование дает

$$\rho_x = 1 - \frac{z}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha}{z + 2x - 2x \cos \alpha} = 1 - \left(\frac{z}{z+4x}\right)^{1/2},$$

отсюда $1 - \rho_x \xrightarrow{z/x \rightarrow 0} (z/x)^{1/2}$, то есть $\lambda = 1/2$.

В двумерном случае для простой квадратной решетки

$$\rho_x = 1 - \frac{z}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \frac{d\alpha d\beta}{z + 4x - 2x \cos \alpha - 2x \cos \beta} = 1 - \frac{z}{\pi} \frac{z}{z+4x} \mathcal{K}\left(\frac{4x}{z+4x}\right),$$

где $\mathcal{K}(k)$ - полный эллиптический интеграл I рода модуля k . В пределе плотной упаковки

$$1 - \rho_x \xrightarrow{z/x \rightarrow 0} \frac{z}{x} \ln \frac{z}{x}.$$

Анализ функций плотности полимерных звеньев для остальных двумерных решеток дает тот же асимптотический закон, которому соответствует значение $\lambda = 1$.

Для размерности три и выше преобразуем подынтегральное выражение следующим образом:

$$\rho_x = 1 - \frac{z}{X(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha_1 \dots d\alpha_d}{z/X + 2 \sum_{i=1}^d (1 - \cos \alpha_i)}$$

Полученный d -мерный интеграл ($d \geq 3$) остается конечным $1/2$ при любом значении отношения z/X . Поэтому

$$1 - \rho_x \xrightarrow{z/X \rightarrow 0} \frac{z}{X},$$

что также соответствует значению $\lambda = 1$.

Таким образом, модель корневых деревьев обладает универсальным поведением в пределе плотной упаковки на любых решетках в размерностях два и выше. Это поведение является классическим в том смысле, что модель на решетке Бете с соответствующим координационным числом обладает тем же самым поведением. Действительно, плотность звеньев на решетке Бете

$$\rho_x = 1 - \left(1 + 2q \frac{X}{z} + (q-2) \left(\frac{X}{z}\right)^2\right)^{-1/2}$$

Отсюда при $q = 2$ $1 - \rho_x \xrightarrow{z/X \rightarrow 0} \left(\frac{z}{X}\right)^{1/2}$,

при $q \geq 3$ $1 - \rho_x \xrightarrow{z/X \rightarrow 0} \frac{z}{X}$.

§ 3. Корреляционные функции

В теории разветвленных полимеров большое внимание уделяется численному изучению таких характеристик полимеров, как среднее количество атомов с данной валентностью. Под валентностью понимается количество прореагировавших химических связей. В решеточных моделях эта величина принимается равной числу звеньев полимера, сходящихся в данном узле. Как будет показано ниже, матричный аппарат модели корневых деревьев позволяет получить аналитические выражения для различных корреляционных функций во всем интервале плотности полимеров. Для простоты будем рассматривать квадратную решетку с декартовыми осями \vec{e}_1 и \vec{e}_2 . Обобщения на другие типы решеток проводятся тривиально.

Далее будет удобно пользоваться переформулировкой модели корневых деревьев как ациклической модели стрелок (АМС) $^{1/6}$.

Пусть в каждом узле решетки находится стрелка единичной длины (в единицах межузельного расстояния). Припишем стрелке вес X , если она принадлежит E , и вес z , если она направлена к демону. Потребуем, чтобы стрелки не образовывали замкнутых путей вдоль их направлений.

Нетрудно показать, что АМС изоморфна модели корневых деревьев. Действительно, если объявить каждую стрелку звеном дерева, то на решетке с демоном возникает остовное дерево, так как в каждом узле есть стрелка по определению АМС. И наоборот, если каждому звену остовного дерева приписать стрелку в направлении кратчайшего пути по звеньям дерева к демону, то возникает АМС.

Рассмотрим некоторую конфигурацию корневых полимеров. На рис. 2а показан узел решетки с координатами $(0,0)$, занятый двухвалентным атомом. В узле $(1,0)$ находится корень полимера. Этому расположению полимера соответствует расположение стрелок АМС, представленное на рис. 2б. Понятно, что для нахождения среднего количества атомов полимера с валентностью два $\langle n_2 \rangle$, необходимо вычислить четырехточечный коррелятор с фиксированными в узлах $(0,0)$ и $(0,-1)$ стрелками в направлениях \vec{e}_1 , \vec{e}_2 соответственно, и стрелками в узлах $(-1,0)$ и $(0,1)$, которые занимают любые ребра, кроме ребер в направлениях \vec{e}_1 и $-\vec{e}_2$ (иначе возникнет узел полимера с валентностью большей, чем два).

Для формулировки рецепта этого вычисления рассмотрим более общую задачу для K стрелок в узлах $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_k$, которым запрещено занимать некоторые ребра. Здесь $\vec{r} = (r_1, r_2)$ - координаты узла. Обозначим производящую функцию таких конфигураций через $\tilde{Z}(z, X)$. Поскольку мы имеем дело с АМС с ограничениями на расположение некоторых стрелок, то задача вычисления $\tilde{Z}(z, X)$ сводится по теореме Кирхгофа к вычислению определителя некоторой матрицы $\tilde{\Lambda}$. Очевидны и изменения, которые надо произвести с матрицей Λ , чтобы получить $\tilde{\Lambda}$: в строке, соответствующей узлу \vec{r}_i , диагональный элемент надо положить сумме весов разрешенных ребер и положить нулю элементы матрицы, соответствующие запрещенным направлениям стрелки \vec{r}_i . Это изменение можно представить в виде матрицы дефектов δ , такой, что

$$\tilde{\Lambda} = \Lambda + \delta.$$

Определим K - частичную корреляционную функцию

$$K = \frac{\tilde{Z}(z, X)}{Z(z, X)}.$$

Тогда

$$K = \frac{\det(\Lambda + \delta)}{\det \Lambda} = \det(I + \delta \Lambda^{-1}). \quad (13)$$

Здесь Λ^{-1} означает обратную к Λ матрицу, I - единичная $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$ матрица. Вычисление последнего определителя производится

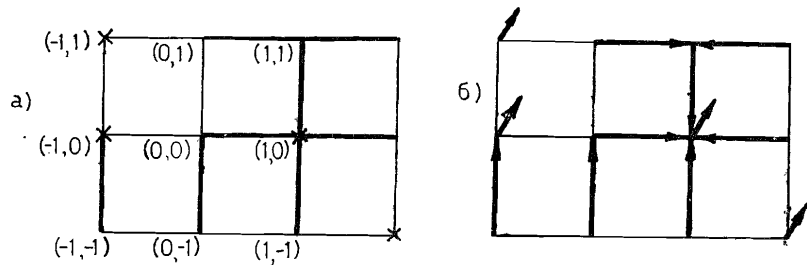


Рис.2. Соответствие между системой корневых разветвленных полимеров (а) и ациклической моделью стрелок (б).

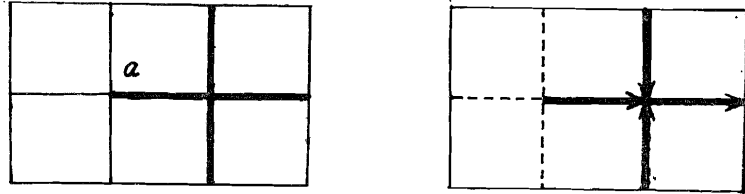


Рис.3. Терминал a , не являющийся корнем, и соответствующая ему конфигурация стрелок.

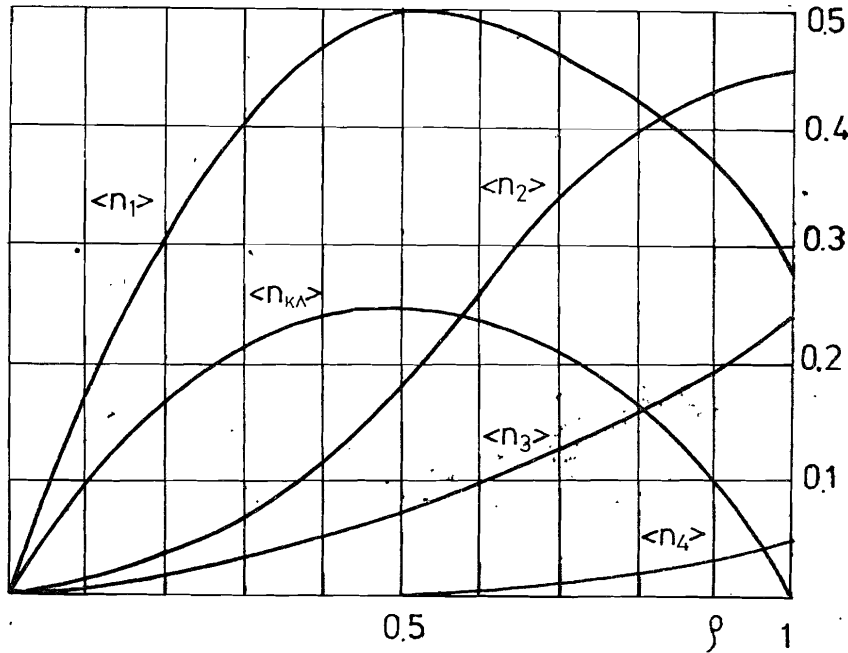


Рис.4. Плотность узлов $\langle n_i \rangle$ с валентностью i и плотность кластеров $\langle n_{kl} \rangle$ в зависимости от ρ .

достаточно просто из-за разреженности матрицы δ . Пусть, например, в матрице δ отличны от нуля четыре элемента δ_{11} , δ_{12} , δ_{21} , δ_{22} , тогда, согласно (13),

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} & 0 & \dots \\ \delta_{21} & \delta_{22} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{11}^{-1} & \lambda_{12}^{-1} & \lambda_{13}^{-1} & \dots \\ \lambda_{21}^{-1} & \lambda_{22}^{-1} & \lambda_{23}^{-1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 + \delta_{11}\lambda_{11}^{-1} + \delta_{12}\lambda_{21}^{-1} & \delta_{11}\lambda_{12}^{-1} + \delta_{12}\lambda_{22}^{-1} & \dots & \dots \\ \delta_{21}\lambda_{11}^{-1} + \delta_{22}\lambda_{21}^{-1} & 1 + \delta_{21}\lambda_{12}^{-1} + \delta_{22}\lambda_{22}^{-1} & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \delta_{11}\lambda_{11}^{-1} + \delta_{12}\lambda_{21}^{-1} & \delta_{11}\lambda_{12}^{-1} + \delta_{12}\lambda_{22}^{-1} \\ \delta_{21}\lambda_{11}^{-1} + \delta_{22}\lambda_{21}^{-1} & 1 + \delta_{21}\lambda_{12}^{-1} + \delta_{22}\lambda_{22}^{-1} \end{pmatrix}$$

Таким образом,

$$K = |I + Q|, \quad (14)$$

где матрица Q получается при перемножении матриц δ и Λ^{-1} , в которых вычеркнуты все нулевые столбцы и строки матрицы δ , а также соответствующие им столбцы и строки матрицы Λ^{-1} .

Матрица Λ была диагонализирована с помощью фурье-преобразования (2), поэтому Λ^{-1} получается с помощью обратного преобразования Фурье, и ее элементы даются выражением

$$\lambda^{-1}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \sum_{m=1}^{l_1} \sum_{n=1}^{l_2} \exp\left\{-2\pi i \left[\frac{m(r_{i1} - r_{j1})}{l_1} + \frac{n(r_{i2} - r_{j2})}{l_2} \right]\right\} \lambda_{mn}^{-1},$$

которое в термодинамическом пределе $l_1, l_2 \rightarrow \infty$ переходит в

$$\lambda^{-1}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\exp\{-i(r_{i1} - r_{j1})\alpha - i(r_{i2} - r_{j2})\beta\}}{z + 4x - 2x \cos \alpha - 2x \cos \beta} d\alpha d\beta. \quad (15)$$

Для вычисления элементов матрицы Q удобно представить их в виде скалярного произведения $Q_{\vec{r}\vec{r}'} = \vec{\Delta}_{\vec{r}} \cdot \vec{L}_{\vec{r}'}$, где $\vec{\Delta}_{\vec{r}}$ — \vec{r} -я строка матрицы дефектов δ , $\vec{L}_{\vec{r}'}$ — \vec{r}' -й столбец матрицы Λ^{-1} . В случае квадратной решетки вектор $\vec{\Delta}_{\vec{r}}$ состоит из пяти компонент

$$\vec{\Delta}_{\vec{r}} = (-\Delta_{\vec{r}}, \Delta_{\vec{r}+\vec{e}_1}, \Delta_{\vec{r}-\vec{e}_1}, \Delta_{\vec{r}+\vec{e}_2}, \Delta_{\vec{r}-\vec{e}_2}),$$

причем $\Delta_{\vec{r}\pm\vec{e}_i}$ равен весу стрелки узла \vec{r} в направлении $\pm\vec{e}_i$, если это направление запрещено, и нулю, если разрешено. Первая компонента равна сумме всех запрещенных весов с обратным знаком. Вектор $\vec{L}_{\vec{r}}$ равен

$$\vec{L}_{\vec{r}} = (\lambda_{\vec{r},\vec{r}}^{-1}, \lambda_{\vec{r}+\vec{e}_1,\vec{r}}^{-1}, \lambda_{\vec{r}-\vec{e}_1,\vec{r}}^{-1}, \lambda_{\vec{r}+\vec{e}_2,\vec{r}}^{-1}, \lambda_{\vec{r}-\vec{e}_2,\vec{r}}^{-1}).$$

Для иллюстрации этого формализма вычислим плотность терминалов, то есть количество атомов полимеров с валентностью один, приходящихся на один узел решетки. Для терминала, не являющегося корнем, соответствующие конфигурации полимера и АМС показаны на рис. 3. Выберем начало координат в узле терминала. Пунктирными линиями обозначены запрещенные ребра для стрелок в узлах $(-1,0)$, $(0,1)$, $(0,-1)$. Для данного четырехточечного коррелятора векторы дефектов выглядят следующим образом:

$$\vec{\Delta}_{(0,0)} = (-z-3x, 0, x, x, x)$$

$$\vec{\Delta}_{(-1,0)} = (-x, x, 0, 0, 0)$$

$$\vec{\Delta}_{(0,1)} = (-x, 0, 0, 0, x)$$

$$\vec{\Delta}_{(0,-1)} = (-x, 0, 0, x, 0)$$

Элементы матрицы Q вычисляются по формулам

$$1 + Q_{11} = Q_{12} = Q_{13} = Q_{14} = -Q_{22} = -Q_{33} = -Q_{44} = \frac{x}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1 - \cos \alpha}{z + 4x - 2x \cos \alpha - 2x \cos \beta} d\alpha d\beta,$$

$$Q_{21} = Q_{34} = Q_{43} = \frac{x}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\cos \alpha - \cos 2\alpha}{z + 4x - 2x \cos \alpha - 2x \cos \beta} d\alpha d\beta,$$

$$Q_{23} = Q_{24} = Q_{32} = Q_{42} = \frac{x}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\cos \alpha - \cos(\alpha + \beta)}{z + 4x - 2x \cos \alpha - 2x \cos \beta} d\alpha d\beta.$$

Подстановка значений элементов матрицы Q в (14) дает величину коррелятора терминалов $\langle n_i \rangle$ при произвольном z/x . Результаты вычисления количества терминалов $\langle n_i \rangle$ приведены на рис. 4. Аналогично вычисляются и более сложные корреляционные функции, соответствующие количеству атомов $\langle n_i \rangle$ валентности i .

Интересно сравнить результаты расчета среднего количества атомов с данной валентностью в пределе плотной упаковки с результатами, полученными путем машинного моделирования /14/ (см. таблицу).

Некоторые отличия можно объяснить следующим обстоятельством. В большинстве работ (к которым принадлежит и работа /14/) моделируется статистика одного полимера, а в рассмотренной выше модели существенно коллективное поведение системы полимеров.

Таблица

	Квадратная решетка				Кубическая решетка					
	$\langle n_1 \rangle$	$\langle n_2 \rangle$	$\langle n_3 \rangle$	$\langle n_4 \rangle$	$\langle n_1 \rangle$	$\langle n_2 \rangle$	$\langle n_3 \rangle$	$\langle n_4 \rangle$	$\langle n_5 \rangle$	$\langle n_6 \rangle$
Ра- бо- та /14/	0,266	0,496	0,212	0,026	0,314	0,430	0,206	0,045	0,0044	0,0001
Дан- ная работа	0,295	0,447	0,222	0,036	0,327	0,410	0,205	0,051	0,0064	0,0003

Поэтому при экстраполяции к плотной упаковке авторы /14/ имели дело с более "рыхлыми" конфигурациями. К тому же они прибегли к линейной экстраполяции, которая вносит в результат дополнительную ошибку.

Литература

1. Broadbent S.R., Hammersley J.M. - Proc. Camb. Phil. Soc., 1957, 53, 629.
2. Харари Ф., В сб.: Прикладная комбинаторная математика, М.; "Мир", 1968, с. 124.

3. Lubensky T.C., Isaacson J., - Phys. Rev., 1979, A20, 2130-2146.
4. Kornilov E.I., Priezzhev V.B., - Phys. Lett., 1984, 102A, 32-33.
5. Klein D.J., - J. Chem Phys., 1981, 75, No 10, 5186-5189.
6. Приезжев В.Б. - ТМФ, 1978, 36, 115-121.
7. Kirchhoff G., - Ann. Phys. Chem., 1847, 72, 497.
8. Temperley H.N.V., - Faraday Soc. Disc., 1958, 25, 92-94.
9. Fortuin C.M., Kasteleyn P.W., - Physica, 1972, 57, 536.
10. Шкловский Б.Н., Эфрос А.Л. - УФН, 1975, П7, с. 425.
11. Харари Ф., Теория графов, М.: "Мир", 1973.
12. Монролл Э.В., В сб.: Прикладная комбинаторная математика, М.: "Мир", 1968.
13. Gaunt D.S., - Phys. Rev., 1969, 179, 174-186.
14. Seitz A., Klein D.J., - J. Chem. Phys., 1981, 75, 5190-5193.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 марта 1986 года.

Корнилов Е.И., Приезжев В.Б. P17-86-168
Теорема Кирхгофа в модели корневых разветвленных полимеров

С помощью теоремы Кирхгофа вычисляются статистические суммы модели корневых разветвленных полимеров на различных решетках. Показано отсутствие фазового перехода в таких системах. Обнаружено универсальное поведение термодинамических функций в пределе плотной упаковки. Разработан матричный аппарат для вычисления корреляционных функций модели. Вычислено среднее число атомов с данной валентностью и количество кластеров во всем интервале плотности полимеров.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Kornilov E.I., Priezzhev V.B. P17-86-168
The Kirchhoff Theorem in Rooted-Branched-Polymers Model

Partition functions of the rooted-branched-polymer model on various lattices have been calculated by the Kirchhoff theorem. The absence of phase transition in such a system has been shown. Universal behaviour of the thermodynamical functions has been found in the limit of a dense packing. A matrix procedure is developed for calculating correlation functions. Average number of atoms with given valences and the number of clusters have been calculated in the whole density range of polymers.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986