

**СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

**P17-87-4**

**А.А.Литвин, В.Б.Приезжев**

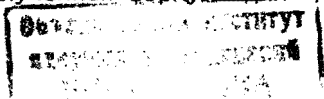
**ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАНИЧНОГО СЛОЯ  
В МОДЕЛИ ПОЛИМЕРОВ БИОМЕМБРАНЫ**

**1987**

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение термодинамических свойств биомембран привело к созданию нескольких моделей полимеров, из которых наиболее известны двумерные модели Нейгла<sup>/1-2/</sup> и трехмерная модель Изуямы и Акуцу<sup>/3/</sup> /в дальнейшем - модель ИА/. Двумерные модели дают очень грубое описание фазового перехода в системе липидных цепей; этот недостаток отчасти компенсируется возможностью точного вычисления статистической суммы. Напротив, трехмерная модель довольно точно воспроизводит картину полимерных конфигураций, однако вычислить ее термодинамические характеристики гораздо труднее. Тем не менее существуют по крайней мере два приближения, удовлетворительно описывающие свойства модели ИА: это приближение парных взаимодействий<sup>/4,5/</sup> и приближение свободных фермионов<sup>/6,7/</sup>. Область применимости первого приближения сосредоточена в окрестности нулевой плотности полимеров, поэтому с его помощью удается правильно определить тип особенности теплоемкости в критической точке<sup>/4/</sup>. Второе приближение оказывается более удовлетворительным при конечных значениях плотности; область его применимости распространена, по-видимому, вплоть до предельной плотности<sup>/8/</sup>.

Одна из важных задач физики полимеров состоит в изучении влияния границ образца на свойства полимерного раствора. Проведенные эксперименты<sup>/8/</sup> указывают на существование вблизи границы так называемого обедненного слоя, в котором плотность полимерных звеньев ниже, чем в глубине образца. Объяснению этого явления посвящено несколько теоретических исследований<sup>/9,10/</sup>, преимущественно полуфеноменологического характера. Цель данной работы - решение модели ИА в присутствии бесконечной плоской границы в приближении свободных фермионов. В разделе 2 дана формулировка модели и кратко изложен путь ее решения. Вместо стандартной техники матрицы перехода, применяемой обычно в моделях свободных фермионов, мы воспользуемся представлением полимеров в виде случайных блужданий<sup>/7/</sup>, подобно тому, как это делается в комбинаторном решении модели Изинга<sup>/11/</sup> и некоторых других решеточных задачах<sup>/12/</sup>. Конкретные вычисления приводятся в разделе 3. Результатом этих вычислений является определение  $\rho_0(x)$  - плотности полимеров на границе как функции активности полимерных звеньев  $x$ . Зная поведение плотности  $\rho(x)$  в глубине образца, мы можем получить зависимость  $\rho_0(\rho)$ . Оказывается, что обедненный слой в модели ИА существует до определенного значения  $\bar{\rho}$ , а затем при  $\bar{\rho} < \rho < 1$  заменяется обогащенным слоем. Другой наблюдаемый эффект, вытекающий из полученной формулы для  $\rho_0(x)$ , - изменение



рода фазового перехода в приграничном слое. При малых отклонениях  $\tau$  от критической активности  $x_c$  мы получаем  $\rho \sim \tau$  в глубине образца и  $\rho \sim \tau^2$  на его границе. Физические причины этих эффектов обсуждаются в последнем разделе работы.

## 2. ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ И МЕТОД РЕШЕНИЯ

Рассмотрим простую квадратную решетку размером  $L \times L$  вместе с размещенными на ней блуждающими точками. Будем обозначать координаты узлов решетки через  $l = (l_1, l_2)$ . Зададим правило блуждания точек. В начальный момент времени  $m = 0$  блуждающие точки находятся в узлах решетки с четно-четными координатами. За единицу времени каждая точка совершает скачок в один из соседних узлов, то есть координата  $l_1$  или  $l_2$  меняется на  $\pm 1$ . При этом двум точкам запрещено занимать один и тот же узел. Развернем во времени траектории блуждающих точек /рис.1/. Видим, что заданное в плоскости блуждание есть не что иное, как модель длинных полимеров на кубической решетке. Координата времени является просто номером плоскости кубической решетки, на которую переходит блуждающая точка. Мы задаем периодическое граничное условие в вертикальном направлении, то есть считаем, что узлы нулевой и  $M$ -плоскости тождественны.

Припишем каждому шагу вес  $x$ , тогда каждый замкнутый путь длины  $K$  имеет вес  $x^K$ , а вес произвольной конфигурации  $g_n$ , состоящей из  $n$  замкнутых непересекающихся и самоизбегающих путей, определяется как

$$\chi(g_n) = \prod_{j=1}^n x^{K_j}. \quad /1/$$

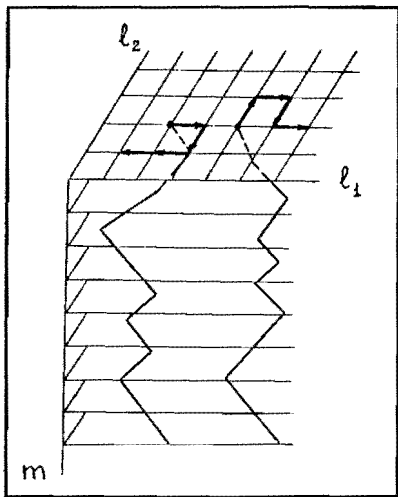


Рис. 1

Задача состоит в вычислении статистической суммы

$$\Lambda(x) = \sum_n \sum_{g_n} \chi(g_n), \quad /2/$$

где суммирование ведется по всем возможным конфигурациям замкнутых непересекающихся и самоизбегающих путей.

Мы воспользуемся приемом, который позволяет переформулировать проблему перечисления всех замкнутых непересекающихся путей как более простую задачу о направленном случайном блуждании единственной частицы на ре-

шетке. В двумерном случае этот прием приводит к точному решению задачи /13/. В случае кубической решетки мы придем к приближению, которое эквивалентно приближению свободных фермионов.

Введем вспомогательную функцию

$$\bar{\chi}(g_n) = (-1)^n \prod_{j=1}^n x^{K_j}. \quad /3/$$

Эта величина также является весом набора путей  $g_n$ , только каждый путь из  $g_n$  взвешен со знаком "минус". Пусть  $P$  - произвольный, непериодический, может быть, самопересекающийся путь, возвращающийся в исходную точку после  $K = kM$  шагов, где  $k \geq 1$  - целое. Непериодичность означает, что ни сам путь, ни один из его участков не может быть представлен в виде  $(P')^m$ , где  $P'$  - замкнутый путь меньшей длины, а  $m > 1$  - целое. Пусть  $K_P$  означает число шагов в пути  $P$ , тогда справедливо соотношение /12/:

$$\prod_P (1 - x^{K_P}) = \sum_n \sum_{g_n} \bar{\chi}(g_n). \quad /4/$$

где в левой части стоит произведение по всем возможным замкнутым непериодическим путям. Приведем простое рассуждение, поясняющее равенство /4/. Каждому члену в разложении левой части /4/ можно сопоставить конфигурацию путей на решетке и наоборот. Рассмотрим простейшую конфигурацию с пересечением в одной точке /рис.2/. 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  $a'$ ,  $b$

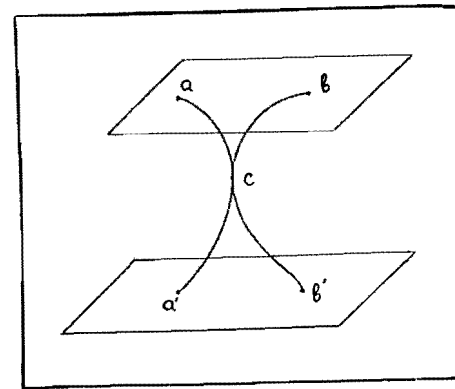


Рис. 2

и  $b'$  эквивалентны/. В разложении левой части /4/ первой ситуации соответствует член  $(-1)^{K_{p1}} (-1)^{K_{p2}}$ , а второй - член  $(-1)^{K_{p1+K_{p2}}}$ . Таким образом, вклады от пересекающихся и самопересекающихся путей сокращаются, и остаются только члены, соответствующие всем слагаемым суммы  $\sum_g \bar{\chi}(g)$ .

Нам нужно установить связь между функциями  $\chi(g)$  и  $\bar{\chi}(g)$ . В случае  $d = 2$  блуждание происходит по двумерной решетке, поэтому любой путь, охватывающий решетку более одного раза, обязательно самопересекается. Следовательно, в сумме  $\sum_g \bar{\chi}(g)$  остаются пути, охватывающие решетку только один раз и, значит,

состоящие из  $M$  шагов. Поэтому простая замена переменных  $\vec{x} \rightarrow x^{i\pi/M}$  приводит к перемене знака в каждом пути. Тогда  $\sum_g \vec{\chi}(g) \rightarrow \sum_g \chi(g)$ , а поскольку мы предполагаем  $M \rightarrow \infty$  вместе с  $L \rightarrow \infty$ , в термодинамическом пределе  $\Lambda(x)$  и  $\Lambda(\vec{x})$  совпадают. В случае  $d = 3$  указанная замена переменных не исключает самоизбегающие пути, охватывающие решетку более одного раза. Эти пути входят в статистическую сумму, причем пути с двукратным обходом решетки входят в статистическую сумму со знаком "минус", с трехкратным обходом - со знаком "плюс" и т.д. Нетрудно убедиться, что такое выражение для статистической суммы полностью соответствует приближению свободных фермионов.

Принимая это приближение, мы имеем

$$\ln \Lambda(x) = \sum_p \ln(1 - x^{K_p}) = - \sum_p \sum_{j=1}^{\infty} \frac{x^{K_p j}}{j} = - \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{\ell} \sum_K \frac{S_K(\ell, m) x^K}{K}, \quad /5/$$

где  $S_K(\ell, m)$  - число всех замкнутых путей длины  $K$ , начинающихся и заканчивающихся в точке с координатами  $(\ell_1, \ell_2, m)$ .

### 3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

Рассмотрим модель полимеров на полупространстве. Пусть для всех случайных путей, определенных в предыдущем разделе,  $\ell_1 \geq 0$ . В вертикальном направлении по-прежнему сохраним периодическое условие, так что все пути остаются замкнутыми, тогда

$$\ln \Lambda(x) = -M \sum_{\ell_1} \sum_{\ell_2} \sum_K \frac{S_K(\ell) x^K}{K}, \quad /6/$$

где  $S_K(\ell)$  - число всех замкнутых путей в полупространстве с длиной  $K$ , начинающихся и заканчивающихся в точке  $(\ell_1, \ell_2, 0)$ . Для вычисления суммы

$$\sum_K \frac{S_K(\ell) x^K}{K}$$

введем функцию  $W_n(\ell | \ell_0; \xi) = S_n(\ell | \ell_0) \xi^n$ , обозначив через  $S_n(\ell | \ell_0)$  число путей длины  $n$ , начинающихся в точке  $\ell_0$  и оканчивающихся в точке  $\ell$ . Пусть

$$W(\ell | \ell_0; \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} W_n(\ell | \ell_0; \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(\ell | \ell_0) \xi^n. \quad /7/$$

Положим в /7/  $\xi = xt \exp(2\pi i j / M)$  и просуммируем обе части по  $j$ .

Так как

$$\sum_{j=1}^M \exp(2\pi i \frac{jn}{M}) = \begin{cases} 0 & \text{при } n \neq 0 \pmod{M}, \\ M & \text{при } n = 0 \pmod{M}, \end{cases} \quad /8/$$

суммирование по  $j$  дает

$$\sum_K S_K(\ell) x^K t^K + 1 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M W_n(\ell | \ell_0; xte^{2\pi i \frac{jn}{M}}). \quad /9/$$

Интегрируя по  $t$  и заменяя сумму по  $j$  интегралом в пределе

$M \rightarrow \infty$  ( $\beta = \frac{2\pi j}{M}$ ,  $d\beta = \frac{2\pi}{M}$ ), получаем

$$\sum_K \frac{S_K(\ell) x^K}{K} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^1 \frac{dt}{t} [W(\ell | \ell_0; xte^{i\beta}) - 1], \quad /10/$$

и логарифм статистической суммы /6/ принимает вид

$$\ln \Lambda(x) = -M \sum_{\ell} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^1 \frac{dt}{t} [W(\ell | \ell_0; xte^{i\beta}) - 1]. \quad /11/$$

Нам осталось найти функцию  $W(\ell | \ell_0; \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} W_n(\ell | \ell_0; \xi)$ . Функция  $W_n(\ell | \ell_0; \xi)$  подчиняется уравнению эволюции:

$$W_{n+1}(\ell | \ell_0; \xi) = \sum_{\ell'} \gamma(\ell | \ell') W_n(\ell' | \ell_0; \xi), \quad /12/$$

где  $\gamma(\ell | \ell')$  - матрица перехода из точки  $\ell'$  в точку  $\ell$ . Обозначим вес скачка блуждающей точки с изменением координаты  $\ell_1$  через  $\xi_1 = x_1 t e^{i\beta}$ , а вес скачка с изменением  $\ell_2$  через  $\xi_2 = x_2 t e^{i\beta}$ . Наша цель - вычисление плотности полимеров на границе. Пусть  $x_0$  - вес единичного шага вдоль границы,  $\vec{x}$  - вес единичного шага от границы. Матрицу  $\gamma(\ell | \ell')$  удобно представить в виде

$$\gamma(\ell | \ell') = p(\ell - \ell') + q(\ell, \ell'), \quad /13/$$

где  $p(\ell - \ell')$  - матрица перехода для блуждания по неограниченной решетке:

$$p(\ell - \ell') = \xi_1 \delta_{\ell_2 \ell'_2} (\delta_{\ell_1 \ell'_1 + 1} + \delta_{\ell_1 \ell'_1 - 1}) + \xi_2 \delta_{\ell_1 \ell'_1} (\delta_{\ell_2 \ell'_2 + 1} + \delta_{\ell_2 \ell'_2 - 1}), \quad /14/$$

а  $q(\ell, \ell')$  - матрица "дефектов", определяемая как

$$q(\ell, \ell') = \begin{cases} 0, & \ell'_1 \neq 0, \\ (\vec{x} - \xi_1) \delta_{\ell_2 \ell'_2} \delta_{\ell_1 1} + (x_0 - \xi_2) \delta_{\ell_1 0} (\delta_{\ell_2 \ell'_2 + 1} + \delta_{\ell_2 \ell'_2 - 1}) - \xi_1 \delta_{\ell_2 \ell'_2} \delta_{\ell_1 - 1}, & \ell'_1 = 0. \end{cases} \quad /15/$$

Уравнение /12/ принимает вид

$$W_{n+1}(\ell | \ell_0; \xi) = \sum_{\ell'} p(\ell - \ell') W_n(\ell' | \ell_0; \xi) = \sum_{\ell'} q(\ell, \ell') W_n(\ell' | \ell_0; \xi). \quad /16/$$

Суммируя обе части /16/ по  $n$  от 0 до  $\infty$  с учетом того, что  $W_0(\ell | \ell_0) = \delta \ell \ell_0$ , получаем

$$W(\ell | \ell_0; \xi) - \sum_{\ell'} p(\ell - \ell') W(\ell' | \ell_0; \xi) = \delta \ell \ell_0 + \sum_{\ell'} q(\ell, \ell') W(\ell' | \ell_0; \xi). \quad /17/$$

Введем Фурье-преобразование функции  $W(\ell | \ell_0; \xi)$ :

$$\tilde{W}(\phi | \ell_0; \xi) = \sum_{\ell_1=0}^{\infty} \sum_{\ell_2=0}^{\infty} e^{i(\phi_1 \ell_1 + \phi_2 \ell_2)} W(\ell | \ell_0; \xi). \quad /18/$$

Тогда уравнение /17/ с учетом /14/ и /15/ принимает вид

$$\tilde{W}(\phi | \ell_0; \xi) [1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2] = \quad /19/$$

$$= e^{i\ell_0 \phi} + \tilde{W}(\ell_1=0, \phi_2 | \ell_0; \xi) [(\tilde{x} - \xi_1) e^{i\phi_1} + (x_0 - \xi_2) \lambda_2 - \xi_1 e^{-i\phi_1}],$$

где  $\lambda_1 = 2 \cos \phi_1$ ,  $\lambda_2 = 2 \cos \phi_2$ ;  $\tilde{W}(\ell_1=0, \phi_2 | \ell_0; \xi) = \sum_{\ell_2=-\infty}^{\infty} e^{i\ell_2 \phi_2} W(\ell | \ell_0; \xi) |_{\ell_1=0}$

Обозначим через  $z = z_{\pm}(\phi_2)$  один из корней уравнения  $1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2 = 1 - \xi_1(z + 1/z) - \xi_2 \lambda_2 = 0$ , так что

$$z_{\pm} = \frac{\kappa \pm d}{2\xi_1}; \quad \kappa = 1 - \xi_2 \lambda_2; \quad d^2 = \kappa^2 - 4\xi_1^2. \quad /20/$$

Тогда

$$\tilde{W}(\ell_1=0, \phi_2 | \ell; \xi) = - \frac{e^{i\ell_2 \phi_2} z^{\ell_1}}{\tilde{x}z + x_0 \lambda_2 - 1} \quad /21/$$

и решение уравнения /19/ принимает вид

$$\tilde{W}(\phi | \ell; \xi) = \frac{e^{i\ell \phi}}{1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2} - \frac{e^{i\ell_2 \phi_2} z^{\ell_1} [(\tilde{x} - \xi_1) e^{i\phi_1} + (x_0 - \xi_2) \lambda_2 - \xi_1 e^{-i\phi_1}]}{(\tilde{x}z + x_0 \lambda_2 - 1)(1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2)} \quad /22/$$

Обратное преобразование Фурье

$$W(\ell | \ell; \xi) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 e^{-i\ell \phi} \tilde{W}(\phi | \ell; \xi) \quad /23/$$

дает решение уравнения /16/:

$$W(\ell | \ell; \xi) = G(\xi) - Q(\ell | \ell; \xi), \quad /24/$$

где

$$G(\xi) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_1 d\phi_2}{1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2}, \quad /25/$$

$$Q(\ell | \ell; \xi) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 \frac{e^{i\ell_1 \phi_1} z^{\ell_1} [(\tilde{x} - \xi_1) e^{i\phi_1} + (x_0 - \xi_2) \lambda_2 - \xi_1 e^{-i\phi_1}]}{(\tilde{x}z + x_0 \lambda_2 - 1)(1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2)}. \quad /26/$$

Зависимость от координаты  $\ell_2$  пропала в силу трансляционной инвариантности в этом направлении. Поэтому имеем

$$\ln \Lambda(x) = -ML \sum_{\ell_1=0}^L \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\beta \int_0^1 \frac{dt}{t} [W(\ell_1 | \ell_1; x t e^{i\beta}) - 1]. \quad /27/$$

Интегрируя /26/ по  $\phi_1$ , мы видим, что должны взять тот из корней  $z_{\pm}$ , который лежит в единичном круге  $|z| < 1$ :

$$Q(\ell_1 | \ell_1; \xi) =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi_2 \frac{z^{\ell_1} [(\tilde{x} - \xi_1) z^{|\ell_1-1|} + (x_0 - \xi_2) \lambda_2 z^{\ell_1} - \xi_2 z^{\ell_1+1}]}{d(\tilde{x}z + x_0 \lambda_2 - 1)}. \quad /28/$$

Суммирование по  $\ell_1$  дает

$$\sum_{\ell_1=0}^{\infty} Q(\ell_1 | \ell_1; \xi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_2}{d(1-z^2)} \frac{(\tilde{x} - \xi_1) z(2-z^2) + \lambda_2(x_0 - \xi_2) - \xi_1 z}{\tilde{x}z + x_0 \lambda_2 - 1}. \quad /29/$$

Плотность полимеров на границе определяется следующей формулой:

$$\rho_0(x_1, x_2) = \frac{1}{ML} \left( \tilde{x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \ln \Lambda + x_0 \frac{\partial}{\partial x_0} \ln \Lambda \right) \Big|_{\substack{\tilde{x} = \xi_1 \\ x_0 = \xi_2}}. \quad /30/$$

Имеем

$$\left( \tilde{x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + x_0 \frac{\partial}{\partial x_0} \right) \sum_{\ell_1=0}^{\infty} Q(\ell_1 | \ell_1; \xi) \Big|_{\substack{\tilde{x} = \xi_1 \\ x_0 = \xi_2}} = \quad /31/$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_1 d\phi_2}{1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2} \left[ \frac{(1 - \xi_2 \lambda_2)^2 - 2\xi_1^2}{\xi_1^2} + \frac{\xi_2}{2\xi_1} \lambda_1 \lambda_2 \right].$$

В /31/ после простых выкладок мы восстановили интеграл по  $\phi_1$ .  
Имея в виду /27/, /30/ и /31/, приходим к окончательному выражению:

$$\rho_0(x_1, x_2) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\beta \iint_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 \int_0^1 \frac{dt}{t} \frac{2 \cos 2\phi_1 + 2 \frac{x_2}{x_1} \cos \phi_1 \cos \phi_2}{1 - 2te^{i\beta}(x_1 \cos \phi_1 + x_2 \cos \phi_2)} \quad /32/$$

Вычислим также плотность полимеров  $\rho(x_1, x_2)$  в трансляционно-инвариантной решетке:

$$\rho(x_1, x_2) = \frac{1}{ML^2} \left( \xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} + \xi_2 \frac{\partial}{\partial \xi_2} \right) \ln \Lambda(x). \quad /33/$$

В этом случае  $W(l|l; \xi) = G(\xi)$ . Тогда

$$\xi_1 \frac{\partial W}{\partial \xi_1} + \xi_2 \frac{\partial W}{\partial \xi_2} = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 \left[ \frac{1}{(1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2)^2} - \frac{1}{1 - \xi_1 \lambda_1 - \xi_2 \lambda_2} \right]$$

и

$$\rho(x_1, x_2) = - \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\beta \iint_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 \frac{2e^{i\beta}(x_1 \cos \phi_1 + x_2 \cos \phi_2)}{1 - 2e^{i\beta}(x_1 \cos \phi_1 + x_2 \cos \phi_2)} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{|2(x_1 \cos \phi_1 + x_2 \cos \phi_2)| > 1} d\phi_1 d\phi_2. \quad /34/$$

Далее мы рассмотрим случай  $x_1 = x_2 = x$ . Выражения /32/ и /34/ преобразуют вид

$$\rho_0(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\beta \iint_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 \int_0^1 \frac{dt}{t} \frac{2 \cos 2\phi_1 + 2 \cos \phi_1 \cos \phi_2}{1 - 2xt e^{i\beta} (\cos \phi_1 + \cos \phi_2)}, \quad /35/$$

$$\rho(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{|\cos \phi_1 + \cos \phi_2| > \frac{1}{2x}} d\phi_1 d\phi_2. \quad /36/$$

Критическая точка данной модели  $x_c = 1/4$ . Исследуем поведение  $\rho$  и  $\rho_0$  вблизи  $x_c$ . Введем  $\tau = x - 1/4$ . При  $x \rightarrow 1/4$  область интегрирования в /36/ показана на рис.3; она равна площади двух кругов радиусом  $r = 4\sqrt{\tau}$ . Таким образом,

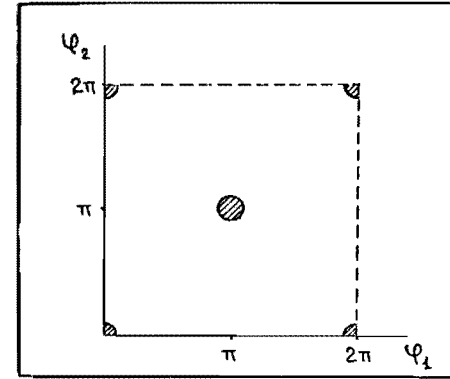


Рис.3

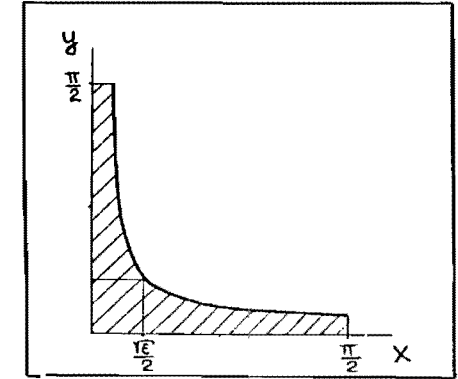


Рис.4

$$\rho(x) \approx \frac{8\tau}{\pi} \quad \text{при } x \rightarrow \frac{1}{4}. \quad /37/$$

Интегрируя /35/ по  $\beta$ , получим

$$\rho_0(x) = \frac{1}{2\pi^2} \iint_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 \int_0^1 \frac{dt}{t} (\cos 2\phi_1 + \cos \phi_1 \cos \phi_2) \times$$

$$\times \theta[|2xt(\cos \phi_1 + \cos \phi_2)| - 1], \quad /38/$$

где  $\theta(y)$  равна нулю при  $y < 0$  и единице при  $y > 0$ . Далее

$$\rho_0(x) = \frac{1}{2\pi^2} \iint_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 (\cos 2\phi_1 + \cos \phi_1 \cos \phi_2) \int_0^1 \frac{dt}{t} \frac{1}{|2x(\cos \phi_1 + \cos \phi_2)|} =$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \iint_{|\cos \phi_1 + \cos \phi_2| > \frac{1}{2x}} d\phi_1 d\phi_2 \ln |2x(\cos \phi_1 + \cos \phi_2)| / (\cos \phi_1 \cos \phi_2 + \frac{1}{2} \cos 2\phi_1 + \frac{1}{2} \cos 2\phi_2). \quad /39/$$

Разлагая в ряд по  $\tau$  подынтегральную функцию и учитывая, что область интегрирования та же, что и для /36/, получаем

$$\rho_0(x) \approx \frac{64\tau^2}{\pi} \quad \text{при } x \rightarrow \frac{1}{4}. \quad /40/$$

Таким образом,

$$\rho_0 = \pi \rho^2 \quad \text{при } x \rightarrow \frac{1}{4}. \quad /41/$$

Теперь исследуем поведение  $\rho$  и  $\rho_0$  при  $x \rightarrow \infty$ , что соответствует пределу плотной упаковки. Введем  $\epsilon = 1/x \rightarrow 0$ . Представим  $\rho$  в виде  $\rho = 1 - \Delta$ , где

$$\Delta = \frac{16}{(2\pi)^2} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} d\eta d\theta = \frac{4}{\pi^2} \iint_{\sin x \sin y < \epsilon/4} dx dy. \quad /42/$$

Область интегрирования показана на рис.4. Имеем

$$\Delta = \frac{4}{\pi^2} \left[ \frac{\epsilon}{4} + 2 \left( \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\epsilon/4 \sin x} dy \right) \right] = \frac{4}{\pi^2} \left[ \frac{\epsilon}{4} + \frac{\epsilon}{4} \ln \frac{8}{\epsilon} \right]$$

или

$$\Delta = \frac{\epsilon}{\pi^2} (1 + 3 \ln 2) - \frac{\epsilon \ln \epsilon}{\pi^2}. \quad /43/$$

Для оценки поведения  $\rho_0$  воспользуемся формулой /38/. Введем обозначение  $\xi = xt$ ,

$$\rho_0 = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^x \frac{d\xi}{\xi} \iint_0^{2\pi} d\phi_1 d\phi_2 (\cos 2\phi_1 + \cos \phi_1 \cos \phi_2) = 1 - \Delta_0,$$

$|\cos \phi_1 + \cos \phi_2| > 1/2 \xi$

где

$$\Delta_0 = \int_x^\infty \frac{d\xi}{\xi} f(\xi),$$

$$f(\xi) = \frac{16}{(2\pi)^2} \int_0^{\pi/2} \int_0^{\pi/2} d\eta d\theta [2 \cos 2\eta \cos 2\theta + \cos 2\eta + \cos 2\theta].$$

$\cos \theta \cos \eta > 1/4\xi$

Интегрирование, аналогичное предыдущему, дает  $f(\xi) = \frac{4}{\pi^2 \xi^2}$

$$\text{и } \Delta_0 = \frac{4}{\pi^2} \int_x^\infty \frac{d\xi}{\xi^2} = \frac{4\epsilon}{\pi^2}. \text{ Таким образом, при } \epsilon = 1/x \rightarrow 0$$

$$\rho = 1 - \frac{\epsilon}{\pi^2} (1 + 3 \ln 2) + \frac{\epsilon \ln \epsilon}{\pi^2}, \quad \rho_0 = 1 - \frac{4}{\pi^2} \epsilon, \quad /44/$$

то есть  $\rho_0 > \rho$ .

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В двумерной модели полимеров с границей приграничный слой является обедненным при любых плотностях<sup>/18/</sup>. График зависимости  $\rho_0(\rho)$  представлен на рис.5. Трехмерная модель содержит новый эффект, а именно: при больших плотностях начиная с  $\bar{\rho} \approx 0,6$  приграничный слой становится избыточным по сравнению со слоями, далекими от границы /рис.6/. Его можно объяснить тем, что при больших плотностях полимеров вакансии /пустоты/ проявляют свойства, сход-

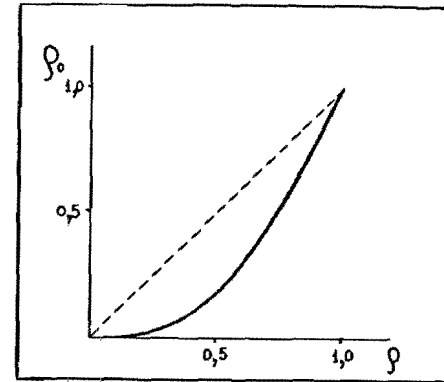


Рис.5

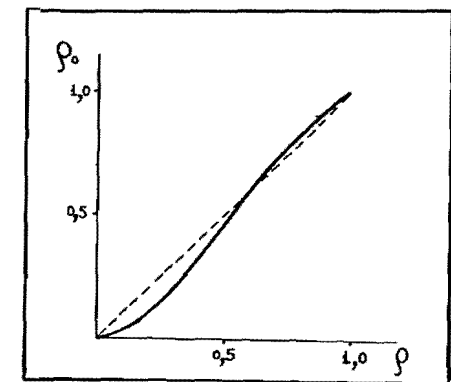


Рис.6

ные с поведением полимеров вблизи критической точки /то есть при малых плотностях/. Причем симметрии в поведении вакансий при больших плотностях и полимеров вблизи критической точки нет в связи с тем, что статистика вакансий разыгрывается на фоне почти плотно упакованных полимеров, имеющих конечную энтропию.

Другим эффектом, полученным в работе, является зависимость рода фазового перехода от расстояния до стенки /кроссовер-эффект/. Подобно тому, как в двумерном случае показатель  $\alpha$  в законе  $\rho \sim r^{\alpha+1}$  меняется от  $\alpha = -1/2$  в глубине образца до  $\alpha' = +1/2$  на границе<sup>/18/</sup>, в трехмерном случае мы получили  $\alpha = 0$  и  $\alpha' = 1$  соответственно. Интересно, что разность  $\alpha' - \alpha = 1$  оказывается одинаковой для размерностей  $d = 2$  и  $d = 3$ , позволяя предположить справедливость этого равенства для высших размерностей.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Nagle J.F. - J.Chem Phys., 1973, 58, No.1, p.252.
2. Nagle J.F. - Proc. Roy. Soc. Lond., 1974, A377, p.569.
3. Izuyama T., Akutsu Y. - J.Phys. Soc.Jap., 1982, 51, p.50.
4. Беляев С.Т. - ЖЭТФ, 1958, 34, вып.1., с.279.
5. Bhattacharjee S.M. et al. - J.Stat.Phys., 1983, 32, p.361.
6. Izuyama T. - Suppl.Progr.Theor.Phys., 1984, No.80, p.210.
7. Kornilov E.I., Priezzhev V.B. - Z.Phys., 1984, B54, p.351.
8. Ausserre D., Hervet H., Rondez F. - Phys.Rev.Lett., 1985, 54, p.1948.
9. Di Marizio E.A. - J.Chem Phys., 1965, 42, p.2101.
10. Светогорски Д.А. Препринт ОИАИ Р17-86-377, Дубна, 1986.

11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976, § 151.
12. Kasteleyn P.W. In: Graph Theory and Theoretical Physics (ed by Harary F.), Academic Press, London, 1967, p.44.
13. Корнилов Е.И., Приезжев В.Б. Препринт ОИЯИ, P17-86-324, Дубна, 1986.

Литвин А.А., Приезжев В.Б.

P17-87-4

Исследование граничного слоя в модели полимеров биомембраны

В приближении свободных фермионов решена модель длинных полимеров на кубической решетке в присутствии бесконечной плоской границы. Показано, что обедненный поверхностный слой заменяется избыточным по сравнению с внутренними слоями при плотности полимеров  $\rho \geq 0,6$ . Установлена зависимость рода фазового перехода от расстояния до стенки.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой

Litvin A.A., Priezzhev V.B.

P17-87-4

Investigation of Boundary Layer of Biomembrane Polymers

The self-avoiding polymer model on a three-dimensional lattice in the presence of infinite plane boundary is solved in the free fermion approximation. It is shown that the depletion boundary layer is replaced by repletion one with the polymer density  $\rho \geq 0.6$ . The phase transition type dependence versus distance from the boundary is studied.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987

Рукопись поступила в издательский отдел  
7 января 1987 года.