объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-90-267

Й.Г.Бранков, В.Б.Величков, В.Б.Приезжев

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В МОДЕЛИ ДИМЕРОВ С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Направлено в "Journal of Molecular Liquids"

1990

I. Введение

Проблема димеров относится к числу традиционных задач решеточной статистики [1]. Она формулируется как модель решеточного двухатомного газа, каждая молекула которого занимает пару смежных узлов регулярной решетки. Близкодействующие силы отталкивания препятствуют попаданию на один узел решетки более чем одной молекулы, а потенциал взаимодействия зависит от взаимного расположения молекул. Среди разнообразных димерных задач особое место занимает проблема перечисления всевозможных конфигураций плотно упакованных димеров, когда все узлы решетки покрыты молекулами. Первое точное решение такой задачи было получено Кастелейном [2] и Фишером и Темперли [3] для двумерной квадратной решетки. Впоследствии Фан и Ву [4] показали, что с помощью димеров можно сформулировать общую модель свободных фермионов. Димерные представления оказались удобными, в частности, для формулировки модели Изинга [1]. Особенно широкое распространение эти представления получили при исследовании двумерных моделей биомембран [5,6], в которых димерным конфигурациям сопоставляются полимерные цепочки. В этом случае стерические ограничения на расположение димеров позволяют учесть эффекты исключенного объема в полимерной системе. Плотно упакованная система димеров обладает важной осбенностью: условия исключенного объёма и полного заполнения решетки порождают дальнодействующие корреляции между димерами, спадающие, вообще говоря, по степенному закону. Именно по этой причине модель димеров на квадратной решетке, не обладая фазовым переходом, представляет собой критическую точку модели Изинга [7]. Для выхода из критического состояния система димеров должна быть разбавлена либо мономерами, либо димерами другого сорта, если рассматривается сложная декорированная решетка, как это имеет место в димерном представлении модели Изинга.

Степенные корреляции в модели димеров позволяют сформулировать интересную проблему. Что произойдет, если в системе димеров, взаимодействующих посредством твердой сердцевины, включить дополнительное взаимодействие между соседними димерами? Впервые такая задача была поставлена в работе Хейлманна и Либа [8], в которой было показано, что включение близкодействующего притяжения между параллельными димерами приводит к появлению фазового перехода в низкотемпературное ориентационно упорядоченное состояние. Доказав существование фазового перехода, Хейлманн и Либ оставили открытым вопрос о классе универсальности рассмотренных ими моделей. Между тем здесь мы сталкиваемся с необычной ситуацией, когда корреляции вне точки фазового перехода убывают степенным образом, а не спадают экспоненциально, как это имеет место во всех известных моделях с близкодействующим потенциалом. Изучение этой ситуации составляет основную цель данной работы.

Включение дополнительного взаимодействия выводит планарную задачу о димерах из класса точно решаемых моделей. Поэтому наш анализ будет основан не на аналитических решениях, а на численном моделировании методом Монте-Карло с помощью специального алгоритма, предложенного в работе /9/. В п. 2 сформулирована модель взаимодействующих димеров и изложена процедура численного моделирования. Главная трудность состоит в неэргодичности алгоритма, генерирующего димерные конфигурации на решетке с периодическими граничными условиями. Во избежание этой трудности нами рассмотрены конечные решетки с открытыми границами. Предварительное исследование поведения теплоемкости как функции температуры для решеток размером 8 x 8, I0 x I0 и I4 x I4 проведено в работе /9/. Полученные результаты указывают на вероятное развитие фазового перехода в термодинамическом пределе. В п. 3 представлены новые данные для решеток больших размеров и приведены результаты их обработки на основе гипотезы конечноразмерного подобия. Раздел 4 посвящен краткому обсуждению.

2. Модель и алгоритм Монте-Карло

Рассмотрим квадратную решетку, состоящую из M строк и N столбцов, полностью покрытую димерами. Горизонтальному димеру припишем статистический вес x, вертикальному – вес y. Взаимодействие между димерами несколько отличается от вариантов, рассмотренных Хейлманном и Либом /8/. Мы будем считать взаимодействующими только димеры, расположенные на противоположных сторонах элементарного квадрата. Каждой паре взаимодействующих димеров, вне зависимости от их ориентации, мы дополнительно сопоставим больцмановский вес e^K. Задача, как обычно, состоит в вычислении статистической суммы

$$Z(K) = \sum_C x^{n(C)} y^{m(C)} e^{KN(C)}, \qquad (I)$$

где $n(C)$, $m(C)$ – числа горизонтальных и вертикальных димеров в конфигурации C, $N(C)$ – число взаимодействующих пар, а суммирование производится по всем допустимым димерным конфигурациям. Рассмотрим произвольную плотную упаковку димеров C на данной решетке. Легко доказать, что в случае решетки со свободными границами всегда найдется пара взаимодействующих горизонтальных или вертикальных ди-

меров. Если число взаимодействующих пар $N(C) > 1$, выберем случайным образом одну из них. Повернем выбранную пару на $\pi/2$, превращая горизонтальную пару в вертикальную или, наоборот, вертикальную в горизонтальную. Мы получим другую конфигурацию C', в которой имеется, вообще говоря, другое число взаимодействующих пар $N(C')$. Совершая эту процедуру многократно, мы получим последовательность димерных конфигураций. Теперь мы должны позаботиться о том, чтобы алгоритм порождал неприводимую случайную цепь конфигураций с гиббсовским стационарным распределением. Построим граф G, узлами которого являются все возможные конфигурации $C_1, C_2, \dots, C_L$ плотно упакованных димеров. Две вершины C_i и C_j графа будем считать связанными ребром, если возможен переход из C_i в C_j путем вращения одной пары взаимодействующих димеров. Пусть $N(C_i)$ – число таких пар в конфигурации $C_i \in G$. Тогда степень вершины C_i (число инцидентных ей ребер) будет равна $N(C_i)$. Действие алгоритма Монте-Карло можно теперь представить как случайное блуждание по графу G с переходными вероятностями p_{ij} между вершинами C_i и C_j. Для того чтобы обеспечить равновесное гиббсовское распределение вероятностей

$$\pi_i^{(eq)}(K) = \exp[KN(C_i)]/\sum_C \exp[KN(C)] \qquad (2)$$

для посещения вершин $C_1, \dots, C_L$ графа G, переходные вероятности p_{ij} можно определить из уравнения детального баланса

$$\pi_i^{(eq)} p_{ij} = \pi_j^{(eq)} p_{ji}. \qquad (3)$$

При отсутствии потенциала взаимодействия между димерами $K = 0$, $\pi_i^{(eq)}(0)$ – равномерное распределение, и решение уравнения (3) имеет простой вид

$$p_{ij}(0) = \begin{cases} \tilde{p}_{ij}, & N(C_i) \ge N(C_j); \\ \tilde{p}_{ij} N(C_i)/N(C_j), & N(C_i) \le N(C_j), \end{cases} \qquad (4)$$

где $\tilde{p}_{ij} = 1/N(C_i)$, если вершины C_i и C_j графа G смежны, и $\tilde{p}_{ij} = 0$ для несмежных вершин. В общем случае конечного взаимодействия между димерами уравнение детального баланса имеет решение /9/

$$
p_{ij}(K) = \begin{cases} \tilde{p}_{ij} \exp\{K[N(C_j) - N(C_i)]\}, & N(C_i) \ge N(C_j), \\ \tilde{p}_{ij} N(C_i)/N(C_j), & N(C_i) \le N(C_j). \end{cases} \tag{5}
$$

Так как число димерных конфигураций на конечной решетке конечно, то эргодичность алгоритма эквивалентна связности графа G и апериодичности случайного блуждания на нем. Легко увидеть, что при наличии периодических граничных условий граф G распадается на несвязные компоненты. Например, можно предъявить димерные конфигурации, в которых нет ни одной пары димеров расположенных на сторонах одного элементарного квадрата. Во избежание трудностей, связанных с определением эргодического алгоритма, мы будем рассматривать решетки со свободными границами. В работе /9/ доказана теорема, устанавливающая эргодичность данного алгоритма в этом случае.

Вычисления проводились на компьютере VAX8350. Были рассмотрены димерные покрытия на квадратных решетках размером $L\times L$, где L – четное число, принимающее значения от 8 до 40. Мы не интересовались эффектами анизотропии и положили равными активности вертикальных и горизонтальных ребер решетки. Монте-Карло шаг на один узел определялся как последовательность в среднем из L^2 попыток поворота случайно выбираемых пар взаимодействующих димеров. Из числа всех попыток совершались только те повороты, которые удовлетворяли критерию Метрополиса. Для того чтобы обеспечить достаточно представительную выборку при разумном расходе машинного времени, для каждого значения параметра взаимодействия K обрабатывались статистически 5×10^4 конфигураций, следующие друг за другом через интервал в один Монте-Карло шаг на узел.

3. Численные результаты и конечноразмерный скейлинговый анализ

В модели димер-димерного взаимодействия, рассмотренной в п.2, теплоемкость пропорциональна флуктуациям числа пар взаимодействующих димеров $N(C)$. Вычисление $N(C)$ для каждой конфигурации C необходимо также для реализации вероятностей перехода (5). Для решетки $L\times L$ удельная теплоемкость на один димер $c_L(K)$ имеет вид

$$
c_L(K) = \frac{2K^2}{L^2}\{M_L^{-1}\sum_{i=1}^{M_L} N^2(C_i) - [M_L^{-1}\sum_{i=1}^{M_L} N(C_i)]^2\}, \tag{6}
$$

где M_L – число всех Монте-Карло шагов. Для оценки дисперсии $N(C)$ в правой части (6) используется описанный выше алгоритм

Монте-Карло, см. также /9/. Зависимость полученных численных оценок для $c_L(K)$ от параметра взаимодействия K показана на рис. I. при разных значениях L. Видно, что существует явно выраженная тенденция к сужению пика теплоемкости с ростом L, причем его высота увеличивается, а положение смещается в сторону более высоких температур (меньших значений K). Естественно попытаться описать это поведение в рамках гипотезы конечноразмерного подобия для систем в окрестности критической точки. В нашем случае, однако, неизвестен вид особенности удельной теплоемкости бесконечной системы $c_\infty(K)$ как функции температуры. Поэтому необходимо рассмотреть два основных варианта: степенной и логарифмической особенности. Если $c_\infty(K)$ имеет степенную особенность вида $|K-K_c|^{-\alpha}$, $\alpha > 0$, то согласно гипотезе конечноразмерного подобия для двумерных систем со свободными границами /I0/ асимптотика $c_L(K)$ при больших L имеет вид

$$
c_L(K) = a^2L^{\alpha/\nu}X_\alpha(atL^{1/\nu}) + \sum_{k=0}^{2} L^{-k}\psi_k(t) + o(L^{-2}), \tag{7}
$$

где $t = (K_c - K)/K_c$, K_c – предполагаемое критическое значение параметра K; α и ν – критические показатели для теплоемкости и корреляционной длины, соответственно; a – метрический коэффициент; $\psi_k(t)$, $k = 0,1,2$, – некоторые регулярные при $t = 0$ функции. Для того чтобы в пределе $L \to \infty$ при фиксированном $t \ne 0$ выражение (7) воспроизводило термодинамический результат, универсальная функция подобия $X_\alpha(\tau)$ при $|\tau| \to \infty$ должна иметь асимптотическое разложение

$$
X_\alpha(\tau) = y_2|\tau|^{-\alpha} + y_1|\tau|^{-\alpha/2-1} + y_0\tau^{-2} + \dots, \tag{8}
$$

где y_0, y_1 и y_2 – универсальные коэффициенты.

В альтернативном случае логарифмической особенности предельной теплоемкости $c_\infty(K)$ мы принимаем для $c_L(K)$ асимптотическое разложение

$$
c_L(K) = 2a^2q_0\ln(aL^{1/\nu}) + a^2X_0(atL^{1/\nu}) + \sum_{k=0}^{2} L^{-k}\psi_k(t) + o(L^{-2}), \tag{9}
$$

где $q_0 > 0$ – универсальная константа, а функция подобия $X_0(\tau)$ имеет при $\tau \to \pm\infty$ асимптотическое поведение

$$
X_0(\tau) \simeq -2q_0\ln|\tau| + C_\pm \tag{10}
$$

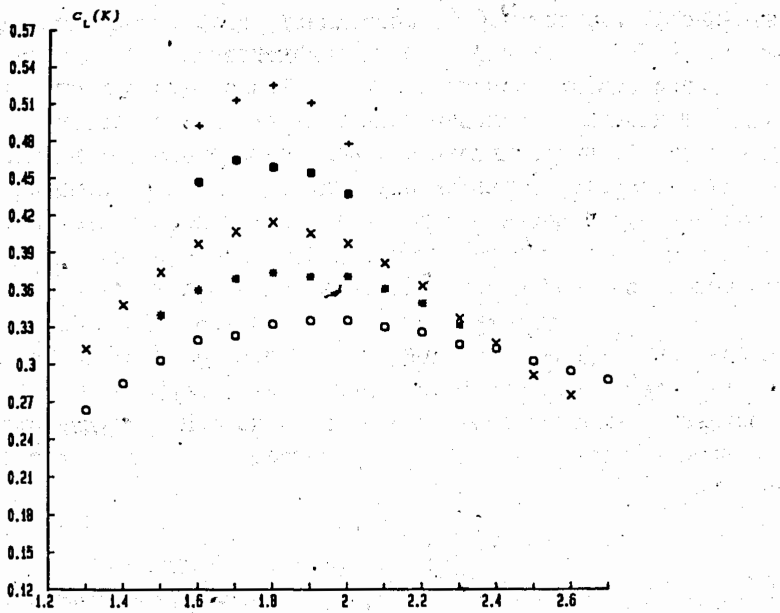

Рис. I
Удельная теплоемкость $c_L(K)$ как функция параметра взаимодействия K для решетки $L \times L$ размером $L = 12$ (□), 16 (∗), 20 (×), 28 (■) и 40 (+).

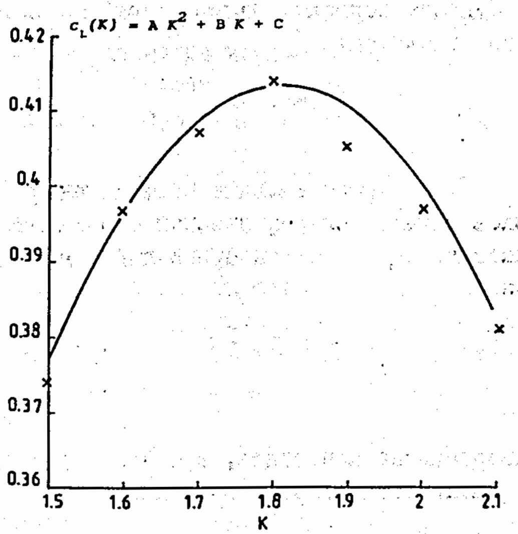

Рис. 2.
Параболическая аппроксимация для $c_L(K)$ в окрестности максимума при $K = K_L^{max}$ для $L = 20$.

с некоторыми универсальными амплитудами $C_\pm$. Гипотеза (9) отличается от предсказания Привмана и Рудника /II/ тем, что учитывает вклады от свободной границы, и тем, что аргумент функции подобия $x_0(\tau)$ выбран в более общем виде $\tau = atL^{1/\nu}$, допускающем нарушение гиперскейлинга. Для определения положения максимума теплоемкости $c_L(K)$ полученные численные данные в его окрестности аппроксимировались параболой, как показано на рис 2. для $L = 20$. Значения $c_L(K_L^{max})$ в точке максимума $K = K_L^{max}$ для больших значений L хорошо согласуются с логарифмическим законом (9), см. рис. 3. Положение максимума K_L^{max} с ростом L стремится к предельному значению $K_c = 1,77$ – точке фазового перехода бесконечной системы. Закон убывания $K_L^{max}-K_c$ подбирался, согласно (9), в виде $bL^{-1/\nu}$. Наилучшее согласие с численными данными получено при значении $1/\nu = 2,5 \pm 0,5$, см. рис. 4. Неопределенность $1/\nu$ обязана кроме статистической ошибки еще и граничным эффектам: мы получаем различные оценки для $1/\nu$, уменьшающиеся по величине при последовательном отбрасывании точек для малых решеток с $L = 8, 10, 12$. Размеры исследованных решеток и точность определения положения максимума теплоемкости $c_L(K)$ пока недостаточны для разделения вкладов от ведущего члена в асимптотическом поведении смещения $K_L^{max}-K$ и от поправок к скейлингу.

4. Обсуждение

Единственной точно решаемой димерной моделью, имеющей сходное поведение, является модель на гексагональной решетке с анизотропным распределением активностей ребер, введенная Кастелейном (К-модель) /7/. В ней имеется фазовый переход при определенных значениях активностей ребер и степенное убывание корреляций вне критической точки в одном направлении, аналогичное поведению корреляций в нашей изотропной модели. Конечноразмерное подобие для теплоемкости К-модели изучалось в работе /I3/, где было высказано предположение о существовании эффективной корреляционной длины, расходящейся в критической точке $t = 0$ как $\xi_x \sim t^{-1/2}$ в одном направлении и как $\xi_y \sim t^{-1}$ - в другом. Корреляционная длина ξ_x соответствует направлению степенного убывания корреляций в К-модели, поэтому естественно предположить среднеполевое значение $\nu' = 1/2$ и в модели, рассматриваемой здесь. Полученная нами оценка $1/\nu = 2,5 \pm 0,5$ не исключает этой возможности.

Характер особенности теплоемкости в критической точке, напротив, различен в этих двух моделях. Корневая особенность $c_\infty(K) \sim t^{-1/2}$ при $T \to T^+$ в К-модели обусловлена специфическими возбуждениями основного состояния (замороженного при $0 \le T < T_c$), которые

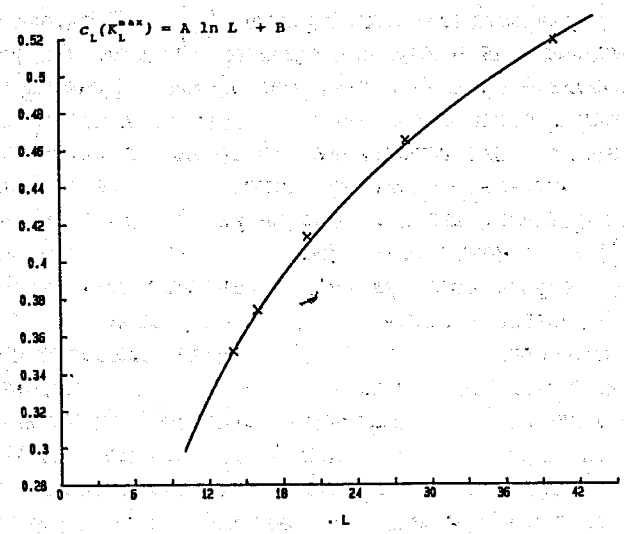

Рис. 3.
Логарифмическая аппроксимация для $C_L(K_L^{max})$ при L = I4,I6,20,28 и 40.

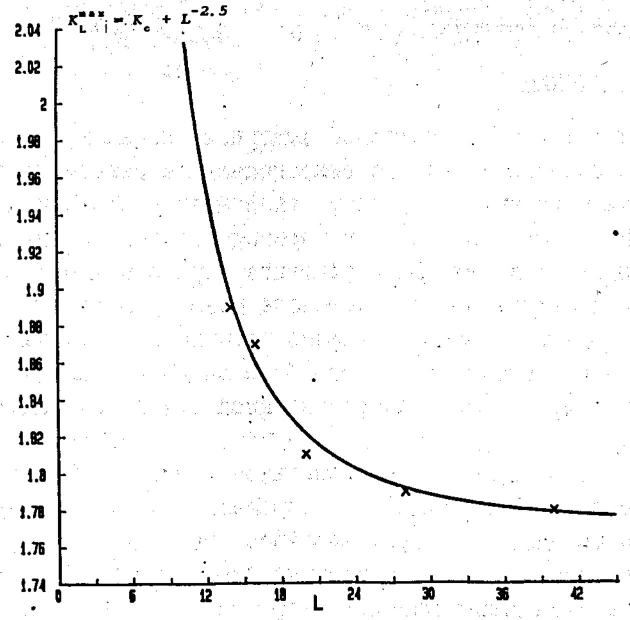

Рис. 4.
Аппроксимация степенным законом $K_L^{max} \simeq K_c + AL^{-1/\nu}$ при L = I4,I6,20,28, и 40 со значением показателя $1/\nu$ = 2,5.

представляют собой доменные стенки длины порядка L. В нашей модели возбуждения, подобно двумерной модели Изинга, имеют вид ограниченных кластеров, рост которых приводит в точке перколяции к фазовому переходу. Именно поэтому полученный нами логарифмический закон для $c_L(K_L^{max})$ согласуется с моделью Изинга, а не с К-моделью.

Литература

1. E.W.Montroll, Lattice statistics. In: Applied Combinatorial Mathematics, edited by E.F.Beckenbach, John Wiley and Sons, New York, 1964.
2. P.W.Kasteleyn, Physica 27, 1209 (1961).
3. H.N.V.Temperley and M.E.Fisher, Phil. Mag. 6, 1061 (1961).
4. C.Fan and F.Y.Wu, Phys. Rev. B2, 723 (1970).
5. J.F.Nagle, J. Chem. Phys. 58, 252 (1973).
6. J.F.Nagle, Ann. Rev. Phys. Chem. 31, 157 (1980).
7. P.W.Kasteleyn, J. Math. Phys. 4, 287 (1963).
8. O.J.Heilmann and E.H.Lieb, J. Stat. Phys. 13, 461 (1975).
9. J.G.Brankov and R.A.Karamikhova, Physica 162A, 298 (1990).
10. V.Privman, Phys. Rev. B38, 9261 (1988).
11. V.Privman and J. Rudnick, J. Phys. A19, L1215 (1986).
12. J.Stephenson and M.E.Fisher, Phys. Rev. 132, 1411 (1963).
13. S.M.Bhattacharjee and J.F.Nagle, Phys. Rev. A31, 3199 (1985).

Рукопись поступила в издательский отдел
I3 апреля I990 года.