

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

Московский институт электроники и математики

Пчелинцев Илья Игоревич

**МАГНИТНЫЕ И ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ИЗИНГА НА СЛУЧАЙНЫХ
БЛУЖДЕНИЯХ НА РЕШЕТКЕ**

Выпускная квалификационная работа
студента образовательной программы бакалавриата
«Прикладная математика»

по направлению 01.03.04 Прикладная математика

Студент

_____ И. И. Пчелинцев

Руководитель ВКР
Доцент,
Е. В. Буровский

Москва 2023 г.

Содержание

1	Введение	1
2	Модели и методы	3

1 Введение

Линейный полимер - одна из классических моделей полимерной физики, с помощью которой исследуется взаимодействие молекулы вещества с разбавленным растворителем, или с другими молекулами, в случае концентрированного раствора. Линейный полимер представляется цепочкой мономеров, взаимодействующих как с раствором, так и друг с другом. Каждый мономер содержит область исключенного объёма, отталкивающую другие, не связанные с ним полимером мономеры, тем самым не допуская нарушения линейной целостности цепочки. Одной из математических интерпретаций полимера с исключенным объёмом вокруг его составляющих выступает случайное блуждание без самопересечений (self-avoiding walk, далее SAW) на некоторой решётке. Конформацию полимера изображают как последовательность неповторяющихся узлов решётки, чем обеспечивается отсутствие самопересечений. Между последовательными парами узлов блуждания обязательно идёт ребро решётки, что ограничивает слишком близкое размещение мономеров, запрещённое исключенным объёмом, а также задаёт участки вокруг узла блуждания, где могут лежать другие мономеры [4, 15].

Между близко расположенными в пространстве мономерами действуют на сближение мономеров силы Ван-дер-Ваальса. В то же время, полимер взаимодействует с молекулами растворителя: "хорошим" для мономера считается растворитель, взаимодействие с которым считается энергетически выгодным, нежели с ближайшими мономерами. В таком случае полимер переходит в развернутое состояние, с малым числом близких связей между мономерами. При взаимодействии с иным растворителем, ситуация обратна и полимер сворачивается в более плотную глобулу, увеличивая внутреннее взаимодействие. Простейшей моделью, симулирующая побродное поведение полимера, является взаимодействующее блуждание без самопересечений на решётке (далее - ISAW), чья энергия равна числу взаимодействий в системе. Свойства системы в термодинамическом равновесии меняются в зависимости от параметра, замещающего все взаимодействия системы константой взаимодействия между узлами. Температура среды, обратно пропорциональная энергии цепочки, отображает свойства растворителя.

Таким образом, между двумя основными конформационными состояниями полимера, описанными выше, расположена точка фазового перехода математической модели ISAW, разделяющая состояния преимущества Ван-дер-Вальсовых сил, эффектов исключенного объёма или взаимодействия мономеров с растворителем. В работе [4] была доказана трикритичность данной системы.

Существуют также полимеры с более сложным внутренним взаимодействием. Магнитные полимеры, или полиэлектролиты, обладают мономерами с зарядами разных знаков, тем самым Ван-дер-Вальсовы силы могут быть также направлены как на притяжение, так и на отталкивание близлежащих мономеров. Система приобретает новые свойства, и теперь, в зависимости от вышеперечисленных ранее факторов, может проявлять парамагнетические свойства или наоборот, приобрести спонтанную намагниченность мономеров и, следовательно, ферромагнетические свойства. Аналогичные свойства добиваются в модели ISAW путём внедрения спиновой подсистемы в конформацию с сохранением условия связи между ближайшими узлами. Таким образом была получена модель Изинга на случайном блуждании без самопересечений (далее - IsingISAW) [1]. Спиновая подсистема модели взята от регулярной модели Изинга на решётке, которая, под действием пара-

метра константы взаимодействия, проявляет парамагнетические или ферромагнетические свойства.

Основным способом исследования подобных моделей являются симуляции их подсистем алгоритмами Монте-Карло [8, 11, 16]. Задачи отличаются периодами релаксации конформационной и спиновой подсистемы. Условия симуляции одной из систем при фиксированном состоянии другой определяют задачи замороженного спинового или конформационного беспорядка. Задача размороженного беспорядка, в свою очередь, задаётся условием равного периода релаксации обеих подсистем, и является менее изученной.

Часть исследований модели проводятся с использованием теории среднего поля - так были рассмотрены магнитные свойства модели IsingISAW с дополнительным внешним полем [7]. Однако, существуют некоторые наблюдаемые величины модели, тесно связанные как с магнитными, так и с конформационными свойствами, чьё исследование требует более статистического подхода. Так же важно учитывать многообразие решёточных структур: некоторые из них имеют слишком большую размерность для достижения аналитического решения, иные содержат внешне незначительные изменения по сравнению с ранее изученными аналогами, но в то же время их критические свойства оказываются полностью различны. В прошлой работе [5] было проведено исследование критического поведения модели IsingISAW на квадратной решётке. Из основных результатов был определён непрерывный характер фазового перехода, а так же оценены критические показатели модели. Подобное исследование проводилось и для трёхмерной модели [6]. Также для квадратной решётки была рассмотрена новая геометрическая характеристика блуждания - доля узлов с фиксированным числом соседей. Одно из основных направлений данной выпускной квалификационной работы посвящено исследованию этой характеристики среди структурных модификаций модели IsingISAW на квадратных решётках при размерности $d=2,3,4$, а так же на треугольной 2D-решётке.

Ранее треугольная решётка была исследована в качестве модификации как взаимодействующего полимера ISAW [10], так и регулярной модели Изинга [12, 13]. В данной работе также исследуется критическое поведение модели IsingISAW на треугольной решётке, а также уточняются результаты прошлых исследований взаимодействующего полимера ISAW.

Дальнейшая работа устроена следующим образом: в секции 2 в деталях описаны исследуемые модели, их модификации, наблюдаемые в рамках экспериментов величины, а также методы симуляций блужданий, секция 3 посвящена исследованию локального координационного числа мономеров блужданий в контексте долей узлов с фиксированным числом соседей на различных решётках, в секции 4 исследуются критические свойства моделей взаимодействующих и магнитных полимеров на треугольной решётке.

2 Модели и методы

В рамках данной работы определяется несколько моделей: в первую очередь определяется модель взаимодействия блуждания без самопересечений ISAW. Энергия системы ISAW с конформацией u (последовательности узлов решётки, на которых размещена цепочка) фиксированной длины N равна числу связей между ближайшими мономерами в цепочке (2.1):

$$E(u) = J \sum_{\langle i,j \rangle} 1 \quad i,j \in u, |u| = N \quad (2.1)$$

$$Z = \sum_u \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) \quad (2.2)$$

Модель рассматривается в каноническом ансамбле, поэтому статистическая сумма модели суммирует все возможные конформации u длины N .

Так же определим модель Изинга на случайном блуждании без самопересечений (далее - Ising-ISAW). В мономерах конформации длины N встроена спиновая подсистема $\{s\}$, принимающая значение в узлах цепочки $+1$ или -1 , вследствие чего энергия рассчитывается между ближайшими узлами цепочки как:

$$E(s,u) = J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad i,j \in u, |u| = N \quad (2.3)$$

Статическая сумма модели берётся по всем возможным последовательностям $\{s\}$ и конформациям u фиксированной длины:

$$Z = \sum_s \sum_u \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) \quad (2.4)$$

в обоих представленных моделях T — температура, k — постоянная Больцмана. Без потери общности можно считать $kT = 1$, тем самым оставляя J единственным самостоятельным параметром модели.

Множество $\langle i,j \rangle$ под знаком суммирования обозначает пары узлов решётки, принадлежащие конформации модели u , между которыми лежит ребро исследуемой решётки. В зависимости от выбранной решётки, для узла конформации меняется множество узлов решётки, которые могут считаться "ближайшими" к нему, ровно как и максимальное количество связей у одного мономера - так называемое "координационное число" решётки. Так, квадратной решётке (левый рисунок 1) соседями узла можно считать мономеры, расположенные сверху, снизу, слева и справа и него, в то время как в треугольной решётке соседними так же считаются и узлы на одной из диагоналей, проходящей через узел решётки, а на кубической — к соседним приравнены узлы с теми же координатами на соседних плоскостях решётки. Узел 4D-гиперкубической решётки имеет 8 соседей, каждый из которых отличается в одной координате на ± 1 от рассматриваемого узла.

Первая часть выпускной квалификационной работы посвящена исследованию *локального координационного числа* мономеров блуждания в виде долей узлов блуждания с фиксированным числом соседей (2.6). Минимальное исследуемое число соседей в моделях блужданий без самопересечений - два, что соответствует внутреннему узлу одномерной цепочки с соседями в виде предыдущего и следующего в последовательности.

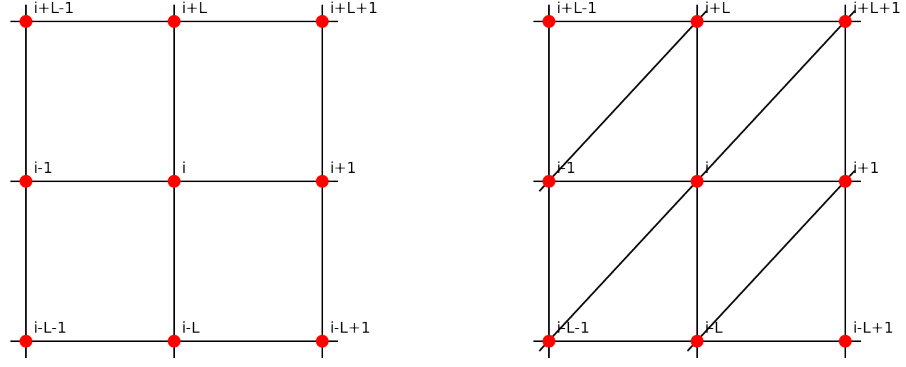


Рис. 1: Связи узлов в квадратной (слева) и треугольной решётках (справа). Узлы пронумерованы последовательно (слева на право и снизу вверх), в одном ряду решётки L узлов.

Максимальное исследуемое число соседей соответствует координационному числу рассматриваемой решётки. Для каждого узла u_i блуждания рассчитывается число его соседей c_i (2.5) и ведётся статистика узлов блуждания с таким же числом соседей.

$$c_i = \sum_{\langle u_i(\text{fixed}), j \rangle} 1 \quad (2.5)$$

$$n_k = \sum_{i=1}^{N-2} [c_i == k] / N \quad (2.6)$$

Определим два основных критических вида перехода, происходящих в моделях - конформационный и магнитный. Конформационный переход разделяет состояние рыхлой цепочки (при высоких температурах / низкой силе взаимодействия) и плотной глобулы (при низких температурах / сильном взаимодействии ближайших узлов). Для исследования конформационного перехода исследуется расстояние между концами блуждания R_N^2 :

$$R_N^2 = (u_{N-1} - u_0)^2 \quad (2.7)$$

Состояния отличаются шкалированием радиуса между концами блужданий $\langle R_N^2 \rangle$ относительно длины цепочки N : при больших длинах цепочки ($N \gg 1$) радиус (2.7) шкалируется по степенному закону.

$$\langle R_N^2 \rangle = N^{2\nu} (C + \dots) \quad (2.8)$$

В качестве основной магнитной характеристики модели рассматривается набор средних намагниченностей нескольких порядков:

$$m^k = \left(\sum_{i \in u} \sigma_i / N \right)^k \quad (2.9)$$

Для поиска точки магнитного перехода рассматривается зависимость кумулянта Биндера U_4 (2.10) от константы J .

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3(\langle m^2 \rangle)^2} \quad (2.10)$$

Для регулярной модели Изинга было доказано [2], что с ростом размеров решётки значение кумулянта сходится к 0 при парамагнетическом состоянии, и к $2/3$, что соответствует ферромагнетическим свойствам модели. В работе [2] так же было обнаружено нетривиальное значение кумулянта, почти независящее от размеров решётки. Значение константы J , при котором достигалась нетривиальная сходимость, являлось точкой магнитного перехода модели. Таким образом, предполагается, что точкой магнитного перехода модели является точка пересечения графиков кумулянта U_4 при разных длинах цепочки.

Ниже представлены известные точки фазового перехода моделей взаимодействующих блужданий (таблица 2), а так же моделей Изинга на регулярных решётках и СБС (таблица 1).

Структура	Решётка	J_c
конформация СБС	Квадратная	0.8340(5) [5]
конформация СБС	3D-кубическая	0.5263 ± 0.055 [6]
регулярная решётка	Прямоугольная	$\ln(1 + \sqrt{2})/2$ [?]

Таблица 1: Известные значения критической точки J_c некоторых модификаций модели Ising-ISAW и прямоугольного Изинга

Решётка	β_c
Квадратная	0.6673(5) [3]
3D-кубическая	0.2779 ± 0.0041 [14]
Треугольная	0.405 ± 0.07 [10]

Таблица 2: Известные значения критической точки β_c некоторых модификаций модели ISAW

Для симуляции моделей в несколькими степенями свобод применяются методы Монте-Карло. Исследуемая модель Ising-ISAW уже рассматривалась ранее в работах [7, 9] задаче замороженного беспорядка - когда свойства модели исследовались генерацией спиновой подсистемы на уже сгенерированных конформациях. В нашей работе исследуется задача динамического беспорядка, в которой генерируются одновременно и блуждания фиксированной длины N , и спиновые состояния на ней. Для этого используется алгоритм на основе метода Червя (для генерации движущихся конформаций), и кластерного алгоритма Вольфа. Для генераций родительских моделей оба метода применяются по отдельности. Полное описание используемого метода моделирования описаны в работе [5].

Список литературы

- [1] M. Aerstens and C. Vanderzande. Ising model on a SAW. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 25:735, 1992.
- [2] K. Binder. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions. *Z. Phys. B*, 43:119, 1981.
- [3] Sergio Caracciolo, Marco Gherardi, Mauro Papinutto, and Andrea Pelissetto. Geometrical properties of two-dimensional interacting self-avoiding walks at the θ -point. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44(11):115004, 2011.
- [4] P-G de Gennes. *Scaling concepts in polymer physics*. Cornell University Press, 1979.
- [5] Kamilla Faizullina, Ilya Pchelintsev, and Evgeni Burovski. Critical and geometric properties of magnetic polymers across the globule-coil transition. *Phys. Rev. E*, 104:054501, Nov 2021.
- [6] Damien Paul Foster and Debjyoti Majumdar. Critical behavior of magnetic polymers in two and three dimensions. *Physical Review E*, 104(2):024122, 2021.
- [7] T. Garel, H. Orland, and E. Orlandini. Phase diagram of magnetic polymers. *Eur. Phys. J. B*, 12:261–268, 1999.
- [8] Neal Madras and Alan D Sokal. The pivot algorithm: a highly efficient monte carlo method for the self-avoiding walk. *Journal of Statistical Physics*, 50(1):109–186, 1988.
- [9] A. Papale and A. Rosa. The Ising model in swollen vs. compact polymers: Mean-field approach and computer simulations. *Eur. Phys. J. E*, 41, 12 2018.
- [10] V Privman. Study of the θ point by enumeration of self-avoiding walks on the triangular lattice. 19(16):3287–3297, nov 1986.
- [11] N. Prokof'ev and B. Svistunov. Worm algorithms for classical statistical models. *Phys. Rev. Lett.*, 87:160601, Sep 2001.
- [12] W. Selke and L. N. Shchur. Critical binder cumulant in a two-dimensional anisotropic ising model with competing interactions. *Phys. Rev. E*, 80:042104, Oct 2009.
- [13] Walter Selke. Critical binder cumulant of two-dimensional ising models. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 51(2):223–228, 2006.
- [14] M C Tesi, E J Janse van Rensburg, E Orlandini, and S G Whittington. Interacting self-avoiding walks and polygons in three dimensions. 29(10):2451–2463, may 1996.
- [15] C. Vanderzande. *Lattice models of polymers*. Cambridge University Press, 1998.
- [16] U. Wolff. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62:361–364, Jan 1989.