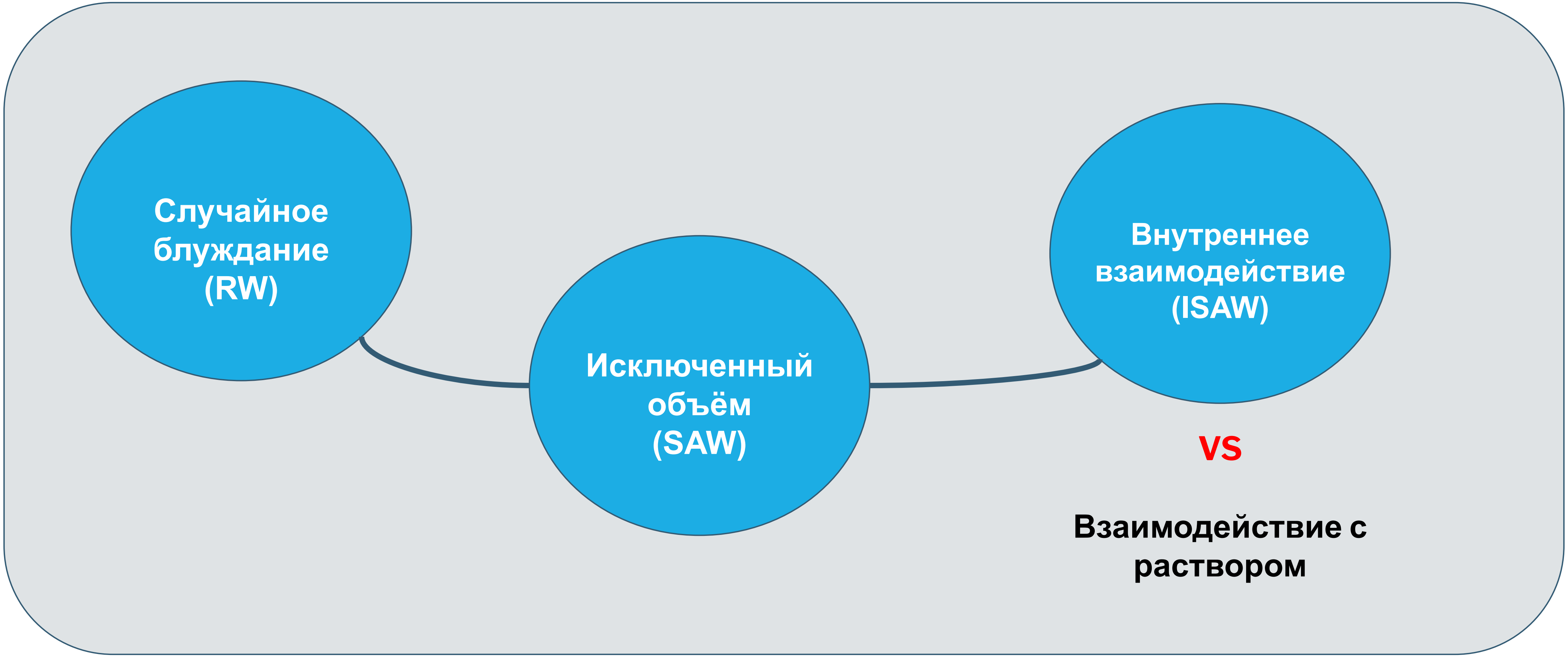
Национальный исследовательский университет
“Высшая Школа Экономики”
Московский институт электроники и математики
Департамент Прикладной математики

МАГНИТНЫЕ И ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ИЗИНГА НА СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЯХ НА РЕШЕТКЕ

Пчелинцев Илья
Научный руководитель:
доцент, Буровский Евгений Андреевич

29 мая 2023 года

ЛИНЕЙНЫЕ ПОЛИМЕРЫ



МОДЕЛЬ ИЗИНГА НА СЛУЧАЙНОМ БЛУЖДАНИИ БЕЗ САМОПЕРЕСЕЧЕНИЙ (Ising-ISAW)

$$E(s,u) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \qquad i,j \in u$$

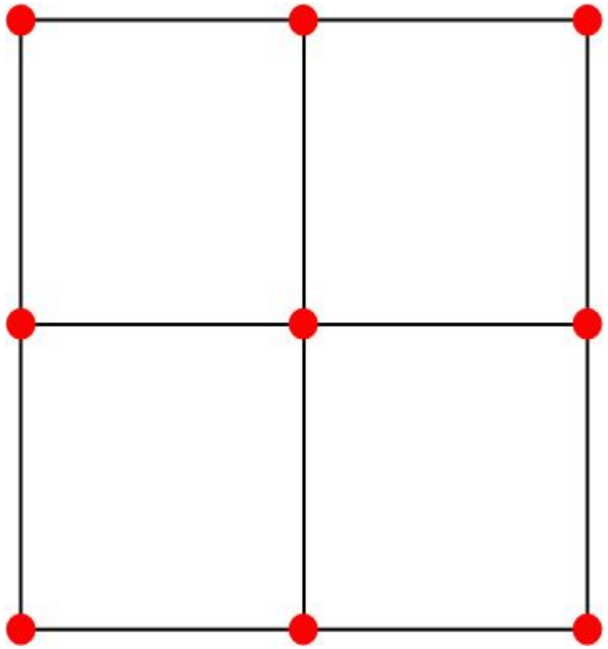
$$Z = \sum_{s} \sum_{u} \exp\left(\frac{-E}{kT}\right), \qquad kT = 1$$

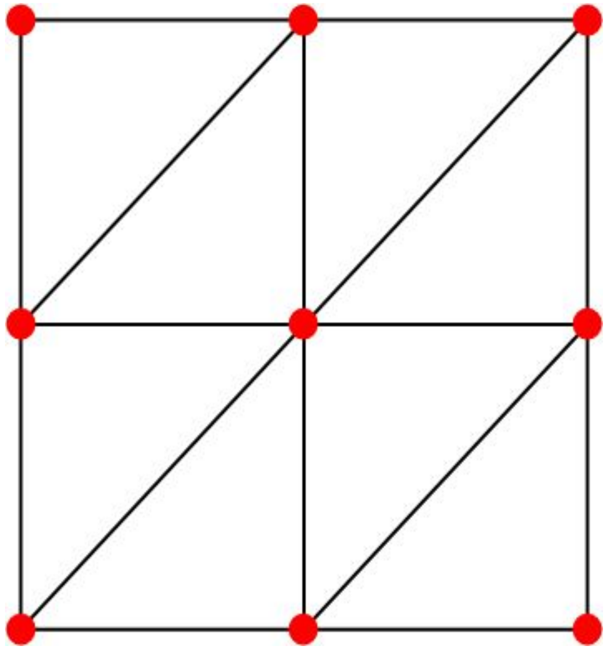
Предельные геометрические состояния модели – фазовый переход “Клубок-Глобула”

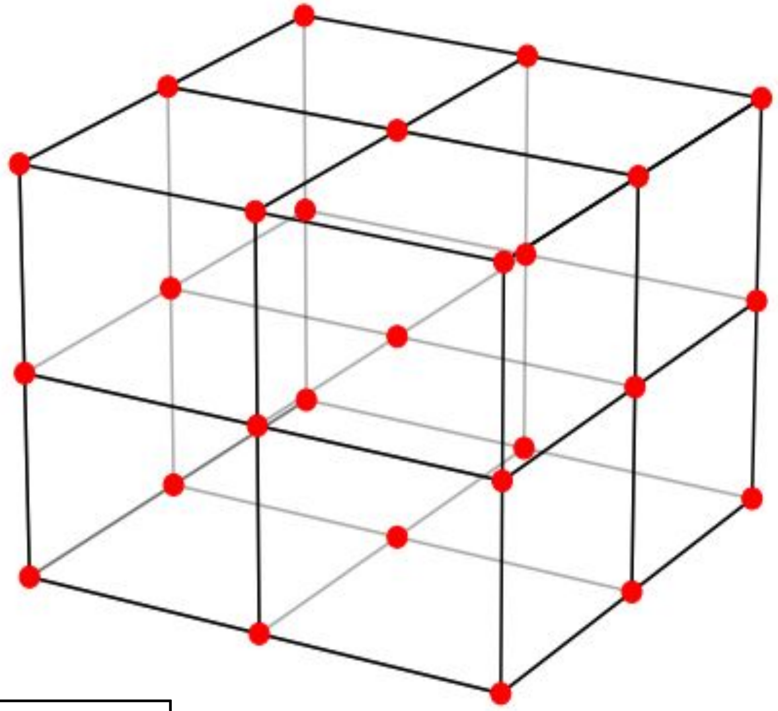
Методы исследования - Монте-Карло:

- Конформации фикс. длины - алгоритм Червя
- Спиновая подсистема - кластерный алгоритм Вольфа

ИССЛЕДУЕМЫЕ РЕШЁТКИ

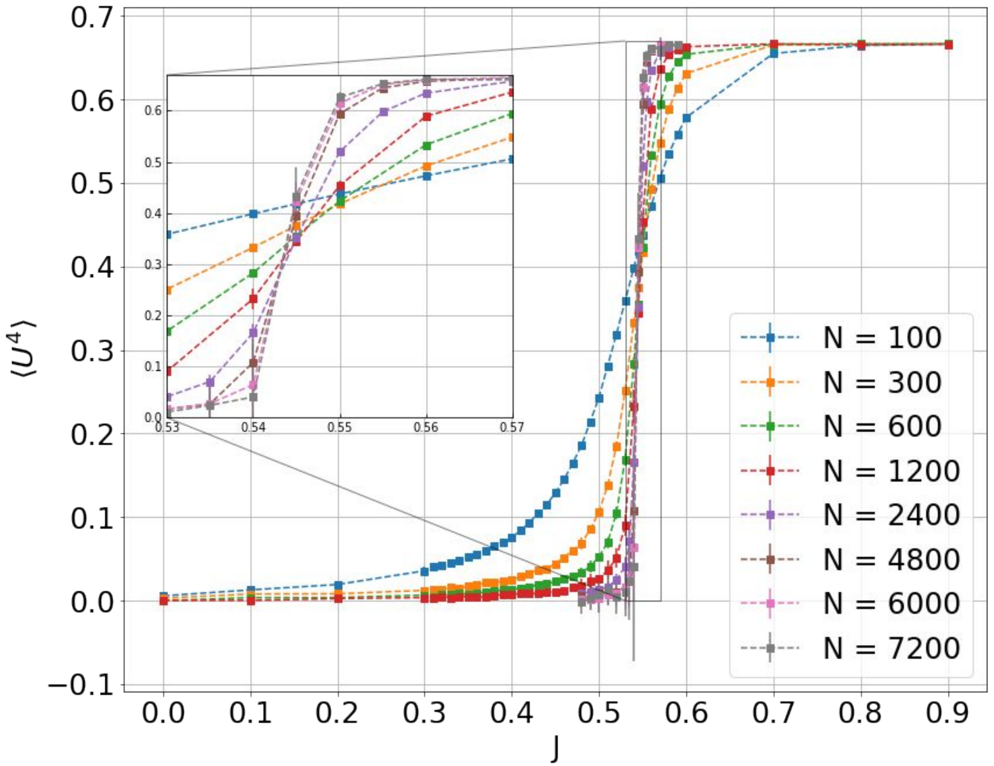






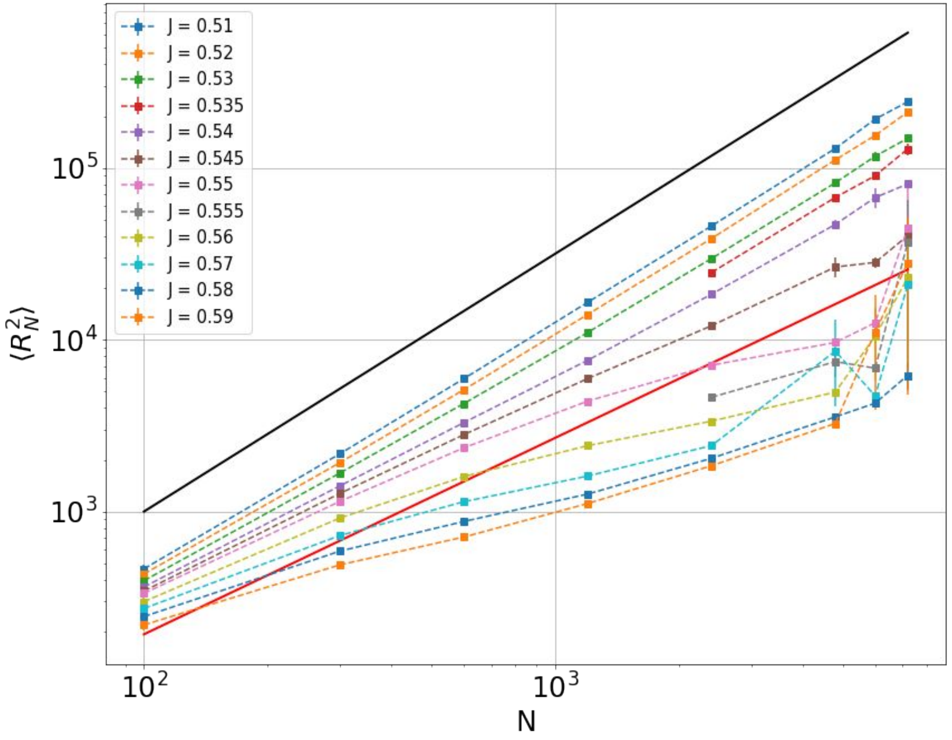
Модель	Фазовый переход Jc		
ISAW	0.6673(5)	0.41(7)	0.278(4)
Ising-ISAW	0.8340(5)	-	0.526(6)

КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МОДЕЛЕЙ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЁТКЕ



Кумулянт Биндера модели Ising-ISAW

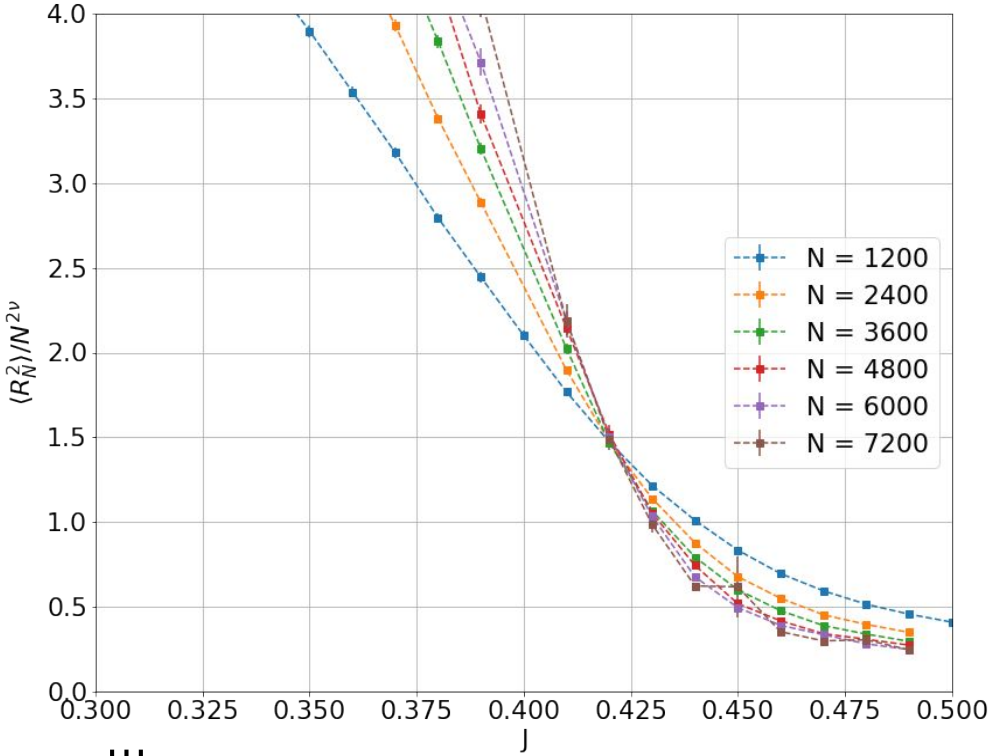
$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3(\langle m^2 \rangle)^2}$$



Шкалирование радиуса между концами блуждания модели Ising-ISAW

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

КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МОДЕЛЕЙ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЁТКЕ



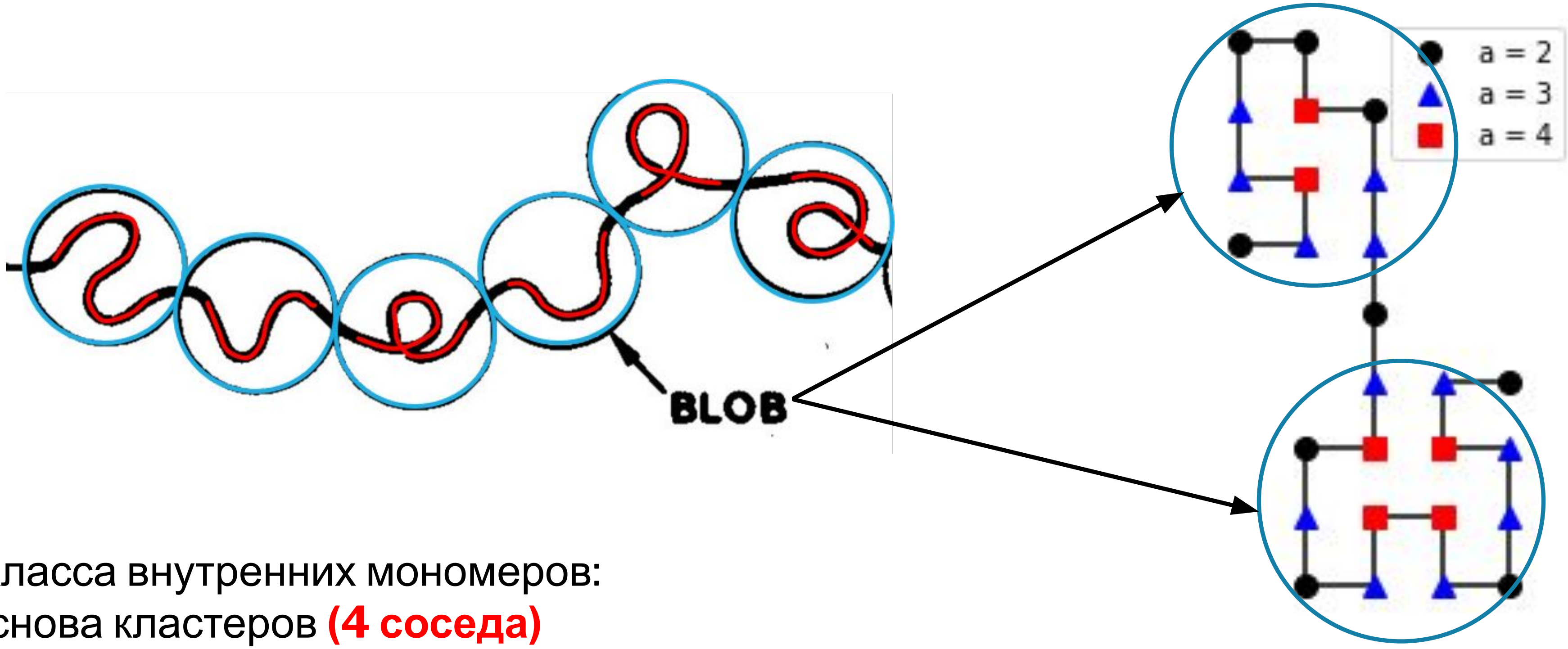
Шкалирование радиуса между концами блуждания модели ISAW

$$\beta = 1/8,\ \nu = 4/7,\ \phi = 0.7$$

Модель	ВКР △
ISAW	0.42(1)
Ising-ISAW	0.545(5)

1. Оценки фазовых переходов треугольных моделей **отличаются** от квадратных
2. Критические экспоненты моделей оказались **идентичны** при **разных** решётках

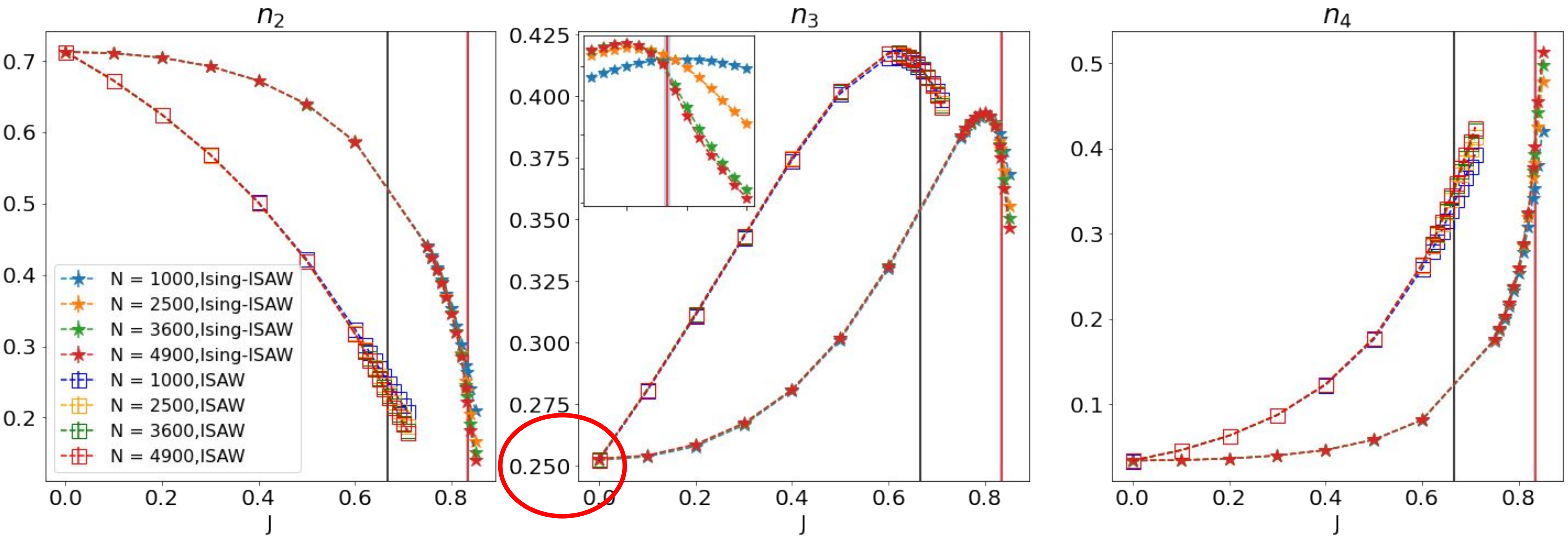
ЛОКАЛЬНОЕ КООРДИНАЦИОННОЕ ЧИСЛО МОДЕЛИ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЁТКЕ



Три класса внутренних мономеров:

- Основа кластеров **(4 соседа)**
- Границы кластеров **(3 соседа)**
- Одномерные цепочки между кластерами **(2 соседа)**

РАННИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛКЧ



Зависимость долей узлов с 2-4-мя соседями от J на квадратной решётке – взято из:
K. Faizullina, IP, E. Burovski Critical and geometric properties of magnetic polymers across the globule-coil transition //Phys. Rev. E **104**, 054501, 2021

1. Нетривиальное поведение доли поверхностных узлов
2. Шкалирование долей ЛКЧ при J=0

?

АТМОСФЕРЫ БЛУЖДАНИЙ

- Изучалось на **невзаимодействующем блуждании без самопересечений** в:
  A. Owczarek, T. Prellberg Scaling of the atmosphere of self-avoiding walks. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 41(37):375004, 2008
- Рассматривалась вероятность атмосферы K у сгенерированного блуждания
- Определен **линейный характер** шкалирования вер-сти относительно длины блуждания

Сходство/различие поведения внутренних и граничных узлов цепочки

?

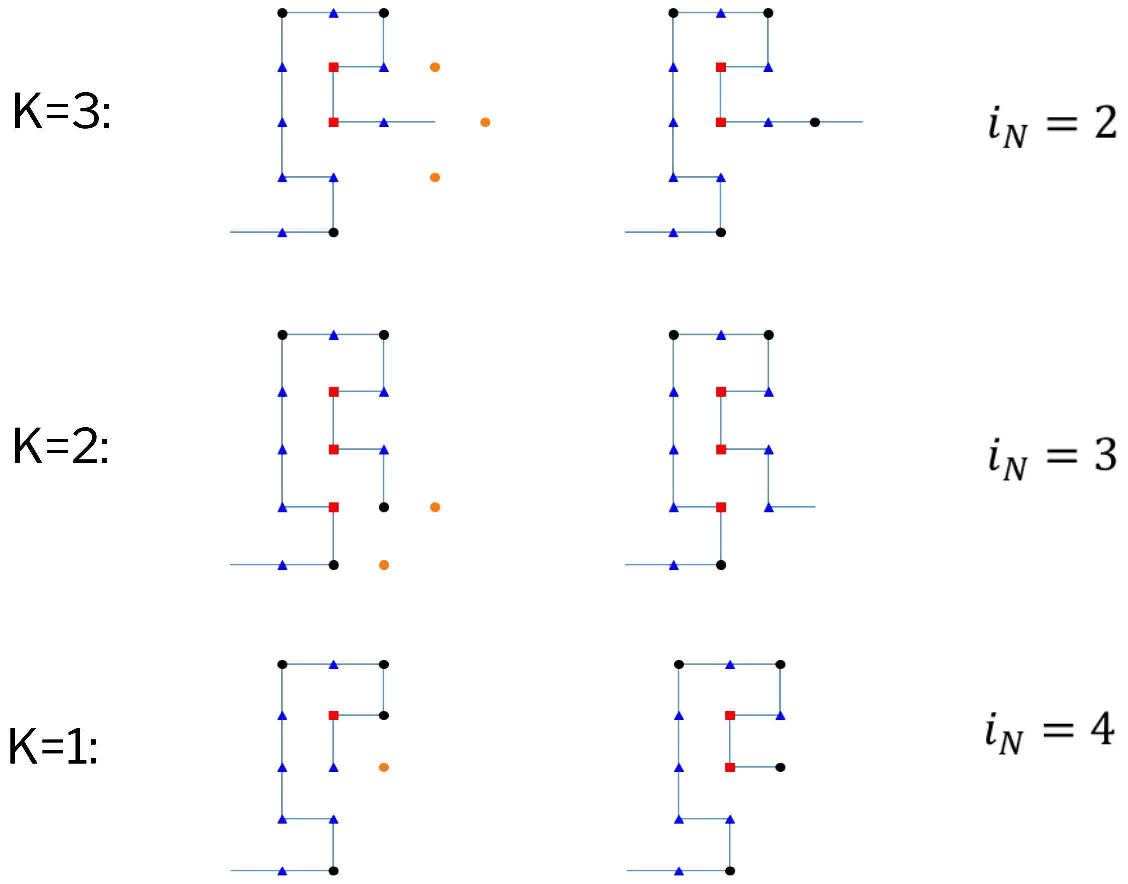
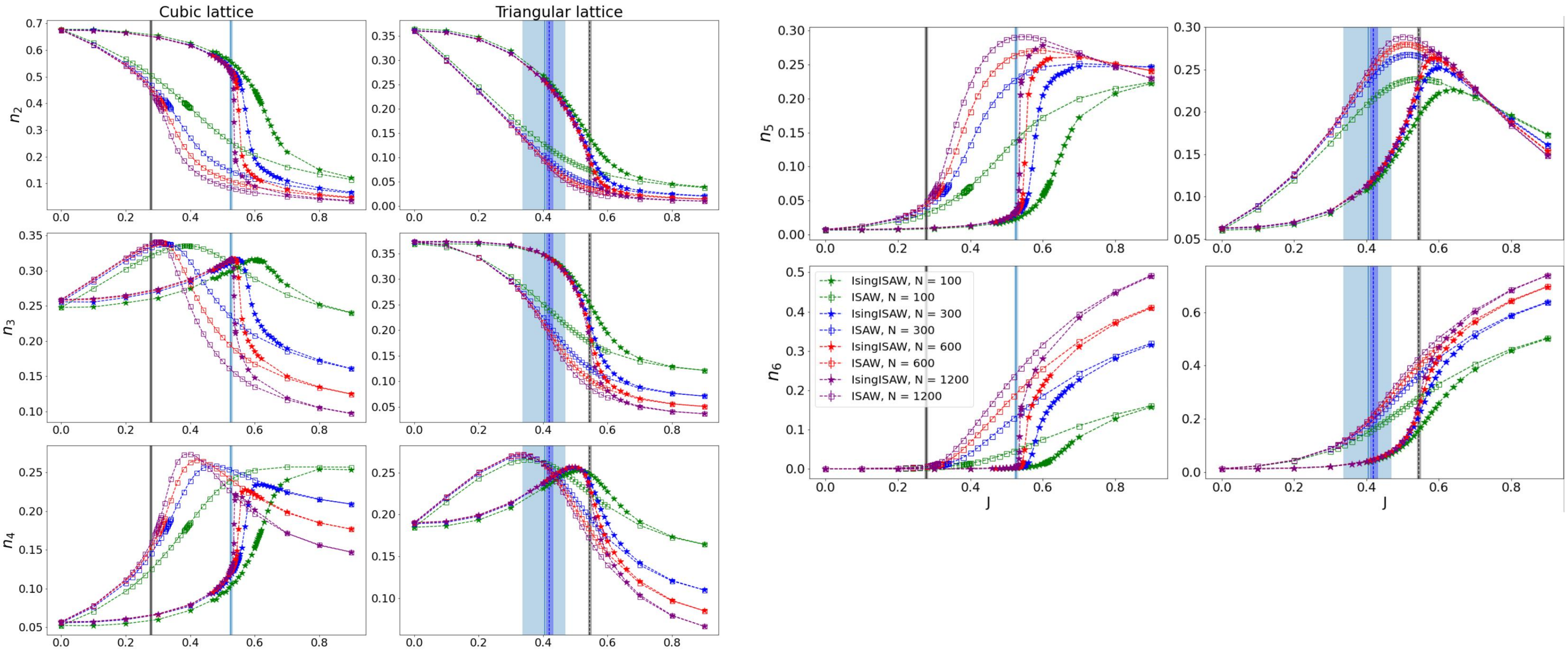


Схема предполагаемого перехода от свойства атмосферы блуждания длины N к числу соседей узлов блуждания длины N+1

СРАВНЕНИЕ ТРЕУГОЛЬНОЙ И КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТОК

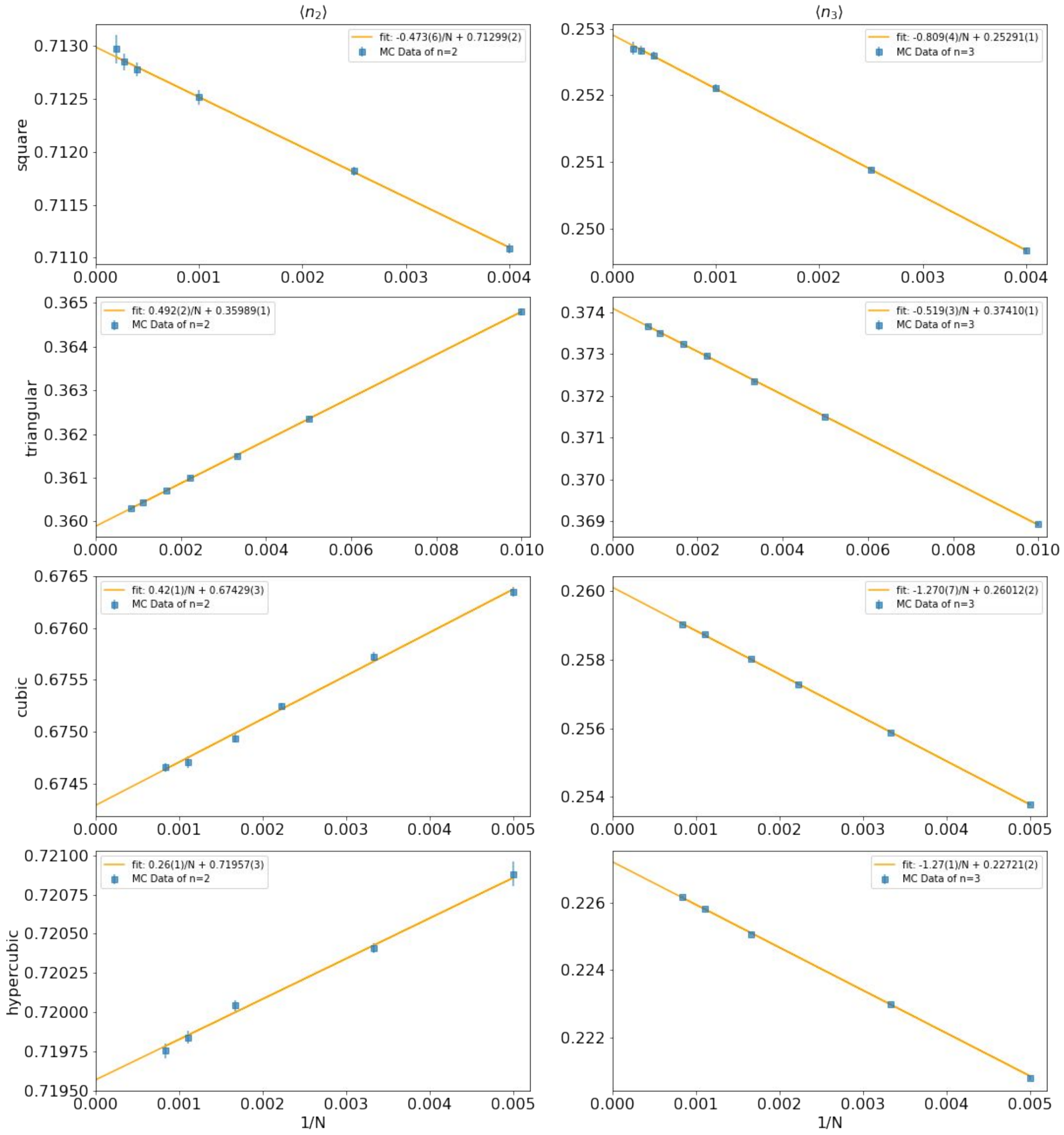


СЛУЧАЙ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ БЛУЖДАНИЙ

$$\langle n_i \rangle = \mathrm{a} * (1/\mathrm{N}) + \mathrm{b}$$

	$\langle n_2 \rangle$	
Lattice	a	b
Square	-0.473(6)	0.71299(2)
Triangular	0.492(2)	0.35989(1)
Cubic	0.42(1)	0.67429(3)
Hypercubic	0.26(1)	0.71957(3)

	$\langle n_3 \rangle$	
Lattice	a	b
Square	-0.809(4)	0.25291(1)
Triangular	-0.519(3)	0.37410(1)
Cubic	-1.270(7)	0.26012(3)
Hypercubic	-1.27(1)	0.22721(2)

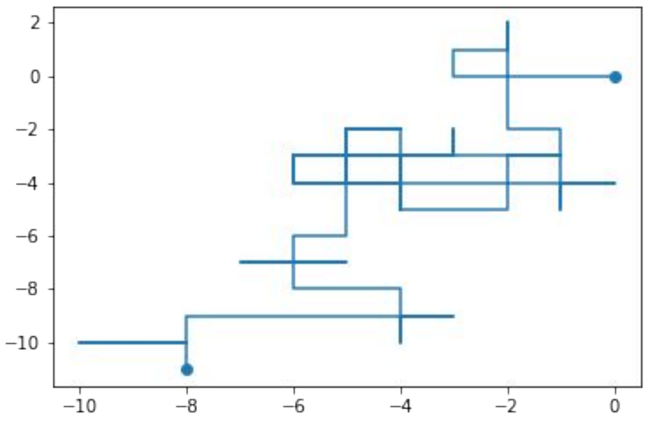


ИТОГИ ИССЛЕДОВАНИЯ СЛУЧАЯ J=0

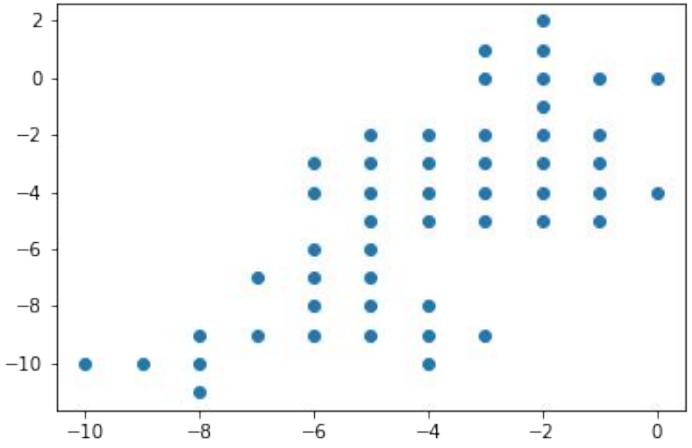
- Линейный характер шкалирования долей ЛКЧ, аналогично атмосферам
- Треугольная решётка проявляет свойства близкие к кубической, чем к квадратной
- Вероятность атмосфер блуждания и доли ЛКЧ внутренних узлов определяют разные аспекты геометрического поведения модели

k	$p^{(k)}$	i	$b(\langle n_i \rangle)$
3	0.711 14(3)	2	0.71299(2)
2	0.225 00(2)	3	0.25291(1)
1	0.054 76(1)	4	0.03410(1)

ПРОСТОЕ СЛУЧАЙНОЕ БЛУЖДАНИЕ (RW)

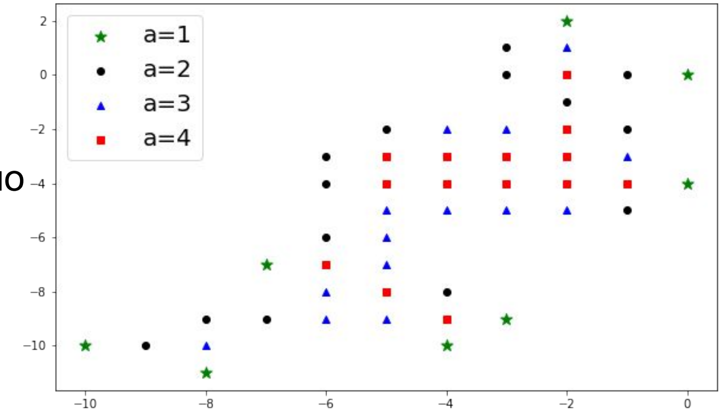


Сгенерированное блуждание
без эффектов исключенного объёма



Набор уникальных узлов

Распределение по
числу соседей



Влияние эффектов
исключённого объёма
на поведение ЛКЧ и
атмосферы блуждания
?

РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ $\langle n_i \rangle$

- **Степенной** характер шкалирования долей узлов, как от числа шагов блуждания, так и числа уникальных узлов
- Степенной закон шкалированния доли уникальных узлов RW
- Схожее численное поведение и равные пределы функций разных аргументов (в пределах ошибок метода аппроксимации)
- У функций от N_unique степенные коэффициенты соразмерно выше чем у функций от N

$$f_i(N) = k_i(1/N)^{a_i} + b_i, \quad i \in \{1{,}2{,}3{,}4, \text{unique}\}$$

	k	a	b	N
n_1	0.3425(8)	0.417(2)	0.014(1)	3000-10000
n_2	0.573(4)	0.171(1)	0.037(2)	3000-10000
n_3	0.588(3)	0.219(3)	0.202(3)	3000-10000
n_4	-1.239(9)	0.189(3)	0.759(5)	500-10000
n_{unique}	0.831(1)	0.2049(2)	0.1616(4)	500-10000

$$g_i(N_{\text{unique}}) = q_i(1/N_{\text{unique}})^{s_i} + d_i, \quad i \in \{1{,}2{,}3{,}4\}$$

	q	s	d	N_{unique}
n_1	0.313(1)	0.479(2)	0.015(1)	967-2875
n_2	0.567(3)	0.214(1)	0.053(2)	967-2875
n_3	0.542(5)	0.244(2)	0.203(2)	967-2875
n_4	-1.20(1)	0.225(4)	0.741(5)	197-2875

РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ $\langle p^{(k)} \rangle$

Аналогично долям узлов:

- Степенной характер шкалирования
- сходство по поведению
- равенство пределов в границах погрешностей
- большая информативность аргумента числа уникальных узлов по сравнению с числом шагов

$$p^{(i)}(N) = k_i(1/N)^{a_i} + b_i, \quad i \in \{0,1,2,3\}$$

	k_i	a_i	b_i	N	start
$p^{(0)}$	-1.17(1)	0.202(7)	0.62(1)	3000-10000	-1, 1, 0.4
$p^{(1)}$	0.54(1)	0.37(3)	0.213(6)	3000-10000	0.5, 0.5, 0.245
$p^{(2)}$	0.596(4)	0.272(6)	0.137(4)	1000-10000	0.5, 0.5, 0.16
$p^{(3)}$	0.613(5)	0.259(6)	0.092(4)	750-10000	0.5, 0.5, 0.15

$$p^{(i)}(N_{\text{unique}}) = q_i(1/N_{\text{unique}})^{s_i} + d_i, \quad i \in \{0,1,2,3\}$$

	q_i	s_i	d_i	N_{unique}	start
$p^{(0)}$	-1.142(9)	0.25(1)	0.59(2)	1533-2875	-1, 1, 0.7
$p^{(1)}$	0.52(1)	0.44(4)	0.214(6)	967-2875	0.5, 0.5, 0.23
$p^{(2)}$	0.585(5)	0.323(7)	0.141(3)	363-2875	0.5, 0.5, 0.16
$p^{(3)}$	0.604(5)	0.310(6)	0.097(3)	281-2875	0.5, 0.5, 0.15

СРАВНЕНИЕ ВЕЛИЧИН ЛОКАЛЬНЫХ КООРДИНАЦИОННЫХ ЧИСЕЛ

- Коэффициенты шкалирующих функций, а также пределы долей ЛКЧ и атмосфер блуждания отличаются значительно сильнее погрешностей
- Между величинами заметно лишь знаковое свойство линейных коэффициентов
- Поведение простого случайного блуждания как по характеру шкалирования, так и по пределам, отлично от дочерней SAW-модели.

v	$d(n_v)$	$d(p^{(4-v)})$
1	0.015(1)	0.097(3)
2	0.053(2)	0.141(3)
3	0.203(2)	0.214(6)
4	0.741(5)	0.59(2)

v	$b(n_v)$	$b(p^{(4-v)})$
1	0.014(1)	0.092(4)
2	0.037(2)	0.137(4)
3	0.202(3)	0.213(6)
4	0.759(5)	0.62(1)