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 блужданиях 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

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 [2, 11].

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 энергетическим 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 пободное поведение полимера, является взаимодействующее блуждание без самопересечений на решётке (далее - ISAW), чья энергия равна числу взаимодействий в системе. Свойства системы в термодиначеском 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 [2] 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 вышеперечисленых 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 самоперечений (далее - IsingISAW) [1]. Спиновая подсистема модели взята от регулярной модели Изинга на решётке, которая, под действием параметра константы взаимодействия, проявляет парамагнетические ими ферромагнетические свойства.

Основным способом исследования подобных моделей являются симуляции их подсистем алгоритмами Монте-

Карло [6, 8, 12]. Задачи отличаются периодами релаксации конформационной и спиновой подсистемы. Условия симуляции одной из систем при фиксированном состоянии другой определяют задачи замороженного спинового или конформацинного беспорядка. Задача размороженного беспорядка, в свою очередь, задаётся условием равного периода релаксации обоих 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 [5]. 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 [3] 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 [4]. 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 взаимодействуего полимера ISAW [7], так и регулярной модели Изинга [9,10]. В данной работе также исследуется критическое поведение модели IsingISAW на треугольной решётке, а также уточняются результаты для взаимодействующего полимера ISAW.

[Абзац по содержанию следующих секций?]

Список литературы

[1] M. Aerstens and C. Vanderzande. Ising model on a SAW. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 25:735, 1992.

[2] P-G de Gennes. *Scaling concepts in polymer physics*. Cornell University Press, 1979.

[3] 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.

[4] Damien Paul Foster and Debjyoti Majumdar. Critical behavior of magnetic polymers in two and three dimensions. *Physical Review E*, 104(2):024122, 2021.

[5] T. Garel, H. Orland, and E. Orlandini. Phase diagram of magnetic polymers. *Eur. Phys. J. B*, 12:261–268, 1999.

[6] 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.

[7] V Privman. Study of the point by enumeration of self-avoiding walks on the triangular lattice. 19(16):3287–3297, nov 1986.

[8] N. Prokof'ev and B. Svistunov. Worm algorithms for classical statistical models. *Phys. Rev. Lett.*, 87:160601, Sep 2001.

[9] 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.

[10] 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.

[11] C. Vanderzande. *Lattice models of polymers*. Cambridge University Press, 1998.

[12] U. Wolff. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62:361–364, Jan 1989.