1985 г. Декабрь *Том 147, вып. 4*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

531.19

ЗАДАЧА О ДИМЕРАХ И ТЕОРЕМА КИРХГОФА

В. Б. Приезжев

СОДЕРЖАНИЕ

Введение 747
1. Димеры 748
2. Теорема Кирхгофа 751
2.1. Матричная теорема о деревьях 752
2.2. Доказательство матричной теоремы 753
2.3. Принцип включения — исключения 755
3. Димеры и остовы 756
4. Димеры на трехмерных решетках 760
Заключение 764
Список литературы 764

ВВЕДЕНИЕ

Два замечательных теоретических результата — матричная теорема Кирхгофа [1] и формула для статсуммы двумерной задачи о димерах [2,3] были получены с интервалом более ста лет в совершенно различных областях физики и, на первый взгляд, не имеют друг с другом ничего общего. Между тем, эти результаты связаны настолько тесно, что в отдельных случаях второй является простым следствием первого. Мы попытаемся выяснить эту связь и вывести из нее некоторые новые следствия, касающиеся статистики димеров.

В первом разделе даны краткие сведения о димерах. Мы ограничимся простейшей постановкой задачи и пояснением метода ее первоначального решения. Подробное решение и применение димеров к другим задачам статистической физики изложены в двух обстоятельных обзорах Монтролла (оба они переведены на русский язык [4]).

Второй раздел содержит необходимые определения из теории графов и теорему Кирхгофа.

Несмотря на то что теория линейных электрических цепей давно стала классической, в учебной литературе трудно найти в объединенном виде «электрическую» и «графическую» части этой теории. Поэтому изложению матричной теоремы предшествует вывод формулы для сопротивления конечной системы проводников.

В третьем разделе демонстрируется связь между теоремой Кирхгофа и проблемой димеров на двумерной квадратной решетке.

В последнем разделе показано, как обнаруженная связь позволяет решить задачу о димерах на некоторой трехмерной структуре типа решетки алмаза.

1. ДИМЕРЫ

Задача о димерах принадлежит к обширному классу моделей решеточного газа [5,6]. Решеточный газ отличается от обычного континуального газа тем, что его молекулы занимают в пространстве не произвольные положения, а располагаются в узлах периодической решетки. Как правило, считается, что из-за сильного отталкивания на малых расстояниях в один узел не может попасть больше одной молекулы. Конфигурационный интеграл по координатам частиц в этом приближении переходит в решеточную сумму, которая в некоторых простых случаях вычисляется точно.

Чаще всего рассматривается газ, молекулы которого имеют сферическую форму и каждая из них занимает только один узел. В этом случае молекула считается точкой, совпадающей с узлом решетки, и называется мономером. Если молекула имеет форму гантели, то в модели решеточного газа она занимает два соседних узла и изображается в виде двух смежных точек, соединенных ребром решетки. Смесь молекул двух сортов образует систему мономеров и димеров. Примером типичной мономер-димерной смеси служит бензольный раствор некоторых углеводородов: дифенила, дифенилметана и дибензила, где мономерами можно считать группы C_6H_6 [7].

Кроме отталкивания в одном узле нужно учесть еще взаимодействие между различными узлами. В газе, состоящем из одних мономеров, обычно рассматривается взаимодействие между соседними точками решетки. Такая

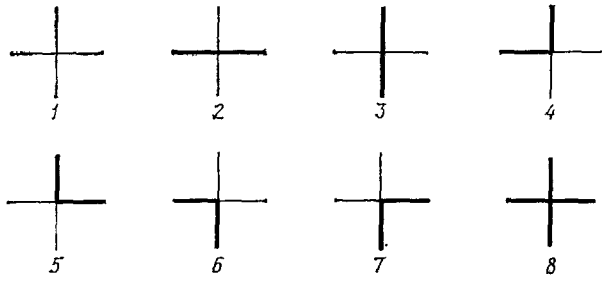

Рис. 1. Графическое представление модели Изинга

модель эквивалентна модели Изинга. Если в газе есть молекулы более сложные чем мономеры, это сравнительно слабое взаимодействие учитывается не всегда, потому что и без него возникает достаточно важная и интересная задача вычисления энтропии смеси различных молекул [8,9].

В общей постановке эта задача очень трудна. В 1960 г. Грин и Липник опубликовали ее решение [10], но их результат оказался ошибочным [11]. Через некоторое время стало ясно, что задача о мономерах и димерах эквивалентна модели Изинга в магнитном поле [12], которая также до сих пор не имеет точного решения.

Единственный случай, когда энтропию удается вычислить точно,— это предел нулевой плотности мономеров. В этом случае вся решетка полностью покрывается димерами, так что каждый узел занят одним, и только одним, димером (предполагается, конечно, что число узлов четно). Задача состоит в перечислении плотных упаковок, т. е. всех способов размещения на решетке из n узлов ($n/2$) димеров. Иногда предел нулевой плотности мономеров называют чистой задачей о димерах, но мы сохраним для него название общей проблемы, поскольку в дальнейшем будем заниматься только этим случаем.

Большое значение, которое имеет перечисление плотных упаковок димеров в статистической физике, объясняется тем, что к этой проблеме сводятся многочисленные решеточные модели. Более точное утверждение выглядит так: любая двумерная модель из класса «свободных фермионов» может быть представлена как задача о димерах на некоторой решетке [13]. Основной и наи-

более изученный представитель класса «свободных фермионов» — это двумерная модель Изинга в нулевом магнитном поле.

Для состояния спиновой системы с гамильтонианом Изинга известно графическое представление в виде набора замкнутых многоугольников [14]. Это означает, что решение модели Изинга может быть сведено к перечислению всех графов, у которых каждый узел принадлежит четному числу ребер. В случае квадратной решетки в узле может сходиться 0,2 или 4 ребра. Все эти возможности изображены на рис. 1. Если теперь рассмотреть решетку

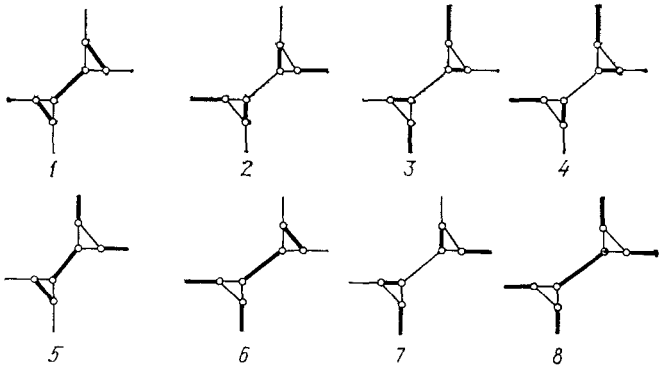

Рис. 2. Димерные покрытия элементарной ячейки, однозначно соответствующие узлам на рис. 1

с более сложной элементарной ячейкой (рис. 2), то можно заметить, что различные способы заполнения элементарной ячейки димерами однозначно соответствуют возможным расположениям ребер в узле квадратной решетки. Поэтому решение задачи о димерах на усложненной решетке после приписывания ребрам нужных весов дает статсумму двумерной модели Изинга на квадратной решетке.

В простейшем виде задача о димерах формулируется следующим образом. Пусть дана квадратная решетка, состоящая из M столбцов и N строк, свернутая в тор для создания периодических граничных условий. Обозначим через $d(m, n)$ число способов полностью покрыть эту решетку m горизонтальными и n вертикальными димерами при условии, что $m + n = MN/2$. Тогда статсумма или производящая функция димерных конфигураций записывается в виде

$$\Lambda(x, y) = \sum_{\substack{m, n \\ (m+n=MN/2)}} d(m, n)\, x^m y^n, \tag{1.1}$$

где x, y — параметры или веса, которым можно придать статистический смысл, выражая их через обратную температуру β и химические потенциалы μ_x, μ_y горизонтальных и вертикальных димеров: $x = \exp(\beta\mu_x)$, $y = \exp(\beta\mu_y)$.

Полное число димерных покрытий F получится, если положить $x = y = 1$:

$$F = \Lambda(1, 1). \tag{1.2}$$

Обычно интересуются свойствами системы при больших M и N:

$$\lambda(x, y) = \lim_{M, N\to\infty} \frac{1}{MN} \ln \Lambda(x, y). \tag{1.3}$$

Основной величиной, характеризующей димерные покрытия, служит молекулярная свобода димера в плотной упаковке

$$\varphi = e^{2\lambda(1,1)}, \tag{1.4}$$

так что число плотных упаковок равно

$$F = \varphi^{MN/2}. \tag{1.5}$$

Из физических соображений ясно, что $\Lambda(x, y)$ растет экспоненциально с увеличением размера решетки (строго этот факт доказан в работе [15]). Нетрудно также дать грубую оценку величины φ: она должна быть больше единицы и не может превосходить 4-координационного числа решетки. Удивительно аккуратная оценка $\varphi = 1{,}786$ была получена Фаулером и Рашбруком в одной из первых работ о димерах [9].

В 1961 г. Кастеляйн [2] и одновременно Фишер и Темперли [3] нашли точное решение проблемы димеров и показали, что

$$\varphi = e^{2G/\pi} = 1{,}791623\ldots, \tag{1.6}$$

где $G = 1^{-2} - 3^{-2} + 5^{-2} - 7^{-2} + \ldots = 0{,}915965\ldots$ — постоянная Каталана. Они же получили общее выражение для статсуммы в пределе больших M, N:

$$\Lambda(x, y) = \exp\left\{\frac{MN}{(2\pi)^2}\int\limits_0^{\pi}\int \ln 2\left[(x^2+y^2) - x^2\cos\theta_1 - y^2\cos\theta_2\right] d\theta_1\, d\theta_2\right\}. \tag{1.7}$$

Вывод этой формулы находится, вообще говоря, в круге тех идей, которые приводят к решению двумерной модели Изинга. Так, например, Либ [16] в 1967 г. получил формулу (1.7) с помощью матрицы перехода — методом, близким к первоначальному решению Онсагера. Новым техническим приемом, использованным в работах [2,3], было введение пфаффиана [6], значительно упростившее громоздкую матричную технику предыдущих решений.

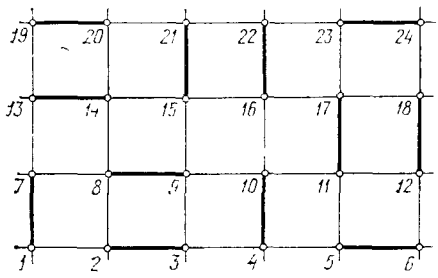

Рис. 3. Плотная упаковка димеров

Пфаффиан антисимметрической матрицы четного порядка $2N$ $A = \{a(p, p')\}$ определяется так:

$$Pf(A) = \sum_P{}' \delta_P a(p_1, p_2)\, a(p_3, p_4) \ldots \ldots a(p_{2N-1}, p_{2N}), \tag{1.8}$$

где суммирование производится по всем перестановкам $P = (p_1, p_2, \ldots, p_{2N})$ чисел $(1, 2, \ldots, 2N)$, удовлетворяющим условиям

$$p_1 < p_2;\ p_3 < p_4,\ p_5 < p_6,\ \ldots,\ p_{2N-1} < p_{2N};\quad p_1 < p_3 < \ldots < p_{2N-1}, \tag{1.9}$$

а множитель δ_P равен 1 для четных и -1 для нечетных перестановок. Легко понять, почему этот матричный объект оказывается удобным для перечисления димерных конфигураций. Рассмотрим квадратную решетку вместе с расположенными на ней димерами (рис. 3). Пронумеруем построчно все узлы решетки. Каждый димер представляется парой чисел (p, p'). Всю димерную конфигурацию можно изобразить в виде

$$(p_1, p_2)(p_3, p_4)\ldots(p_{2N-1}, p_{2N}), \tag{1.10}$$

упорядочивая димеры слева направо и снизу вверх. Для конфигурации, изображенной на рис. 3, получается следующее представление:

$$(1, 7)\,(2, 3)\,(4, 10)\,(5, 6)\,(8, 9)\,(11, 17)\ldots(23, 24). \tag{1.11}$$

В этой записи перестановка $(p_1, p_2, \ldots, p_{24})$ чисел $(1, 2, \ldots, 24)$ подчиняется тем же условиям (1.9), что и матричные индексы в определении пфаффиана, а число способов удовлетворить неравенствам (1.9) совпадает с числом димерных конфигураций. В матрице $A = \{a(p, p')\}$, определяемой условиями

$$a(p, p') = \begin{cases} x, & \text{если } p \text{ и } p' \text{ горизонтально смежны,} \\ y, & \text{если } p \text{ и } p' \text{ вертикально смежны,} \\ 0, & \text{если } p \text{ и } p' \text{ не смежны,} \end{cases} \tag{1.12}$$

каждому ненулевому матричному элементу $a(p, p')$ можно сопоставить димер (p, p') с его весовым фактором. Из приведенных соображений следует, что

$$\mathrm{Pf}\,(A) \sim \Lambda\,(x,\ y) \tag{1.13}$$

с точностью до знаков перед членами разложения левой части, которые в половине случаев отрицательны.

Несмотря на столь удачное представление статсуммы, все трудности еще впереди, так как нужно сделать положительными остальные члены разложения пфаффиана и вычислить его. На пути преодоления этих трудностей вводится понятие суперпозиционных многоугольников, доказывается теорема Кастеляйна, конструируется циклическая матрица и, наконец, используется простая (но не тривиальная) формула

$$\mathrm{Det}\,A = (\mathrm{Pf}\,A)^2, \tag{1.14}$$

связывающая детерминант и пфаффиан антисимметрической матрицы. Все эти шаги подробно объясняются в уже упоминавшихся обзорах Монтролла, и мы не будем больше на них останавливаться, а отложим вывод формулы (1.7) до гл. 3, где она будет получена как следствие теоремы Кирхгофа.

2. ТЕОРЕМА КИРХГОФА

Рассмотрим связную электрическую цепь, состоящую из точек 1, 2, ..., N, произвольным образом соединенных проводниками. Обратное сопротивление проводника, соединяющего точки i и j, обозначим через x_{ij}. Пусть в точках k и l к цепи подключен источник тока I. Обозначим через v_i потенциал, возникший в точке i. Закон Ома в сочетании с первым законом Кирхгофа дает:

$$\left.\begin{aligned} &\sum_{j\neq k} x_{kj}\,(v_k - v_j) = I; \\ &\sum_{j\neq i} x_{ij}\,(v_i - v_j) = 0, \quad i \neq k,\ l, \\ &\sum_{j\neq k} x_{lj}\,(v_l - v_j) = -I, \end{aligned}\right\} \tag{2.1}$$

или в более компактном матричном виде

$$I_i = \sum_{j=1}^{N} T_{ij} v_j, \qquad i = 1,\ 2,\ \ldots,\ N, \tag{2.2}$$

где $I_i = I\,(\delta_{ik} - \delta_{il})$ и

$$T_{ij} = \begin{cases} \sum\limits_{m\neq i} x_{im}, & i = j, \\ -x_{ij}, & i \neq j. \end{cases} \tag{2.3}$$

Для определения разности потенциалов $v_k - v_l$ достаточно рассмотреть $N - 1$ независимых уравнений. Учитывая, что, по определению матрицы T,

$$\sum_{j\neq l} T_{ij} = -T_{il}, \tag{2.4}$$

перепишем первые $N - 1$ уравнений (2.2) в виде

$$I\delta_{ik} = \sum_{j=1}^{N} T_{ij}\,(v_j - v_l), \qquad i,\ j \neq l. \tag{2.5}$$

Эта система имеет решение

$$v_k - v_l = I\,\frac{|T^{(k,\,l)}|}{|T^{(l)}|}\,; \tag{2.6}$$

здесь $|T^{(l)}|$ — детерминант матрицы, получающейся из T вычеркиванием строки и столбца с номером l, а детерминант $|T^{(l,k)}|$ — вычеркиванием двух строк и столбцов k и l. Из равенства (2.6) сразу следует выражение для сопротивления R_{kl} между точками k и l данной цепи:

$$R_{kl}=\frac{|T^{(k,\,l)}|}{|T^{(l)}|} \tag{2.7}$$

Полученная формула есть следствие законов Кирхгофа. Матричная теорема Кирхгофа придает этой формуле геометрический смысл.

Для того чтобы сформулировать матричную теорему, рассмотрим нашу электрическую цепь как граф G с N помеченными (пронумерованными) вершинами. Вершины i и j соединены ребром и считаются смежными, если

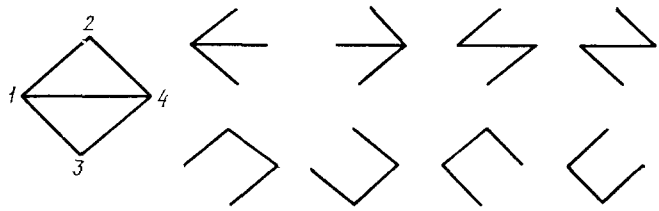

Рис. 4. Граф и все его остовы.
Первые четыре остова содержат ребро (14)

в цепи имеется проводник, соединяющий точки i и j. Графу G можно сопоставить $(N \times N)$-матрицу A, называемую матрицей смежности. В этой матрице $a_{ij} = 1$, если вершина i смежна с вершиной j, и $a_{ij} = 0$ в противном случае. Естественно потребовать, чтобы в цепи не было замкнутых петель, выходящих и входящих в одну точку; тогда диагональные элементы A равны нулю.

Циклом в графе G называется чередующаяся последовательность вершин и ребер, в которой начальная и конечная вершины совпадают. Связный граф называется деревом, если в нем нет циклов. Говорят, что подграф H графа G покрывает G, если каждая вершина G является вершиной H. Остовом графа G называется покрывающее его дерево. На рис. 4 изображен граф вместе со всеми его остовами.

Пусть M — матрица, полученная из $(-A)$ заменой каждого i-го элемента главной диагонали на число вершин, смежных с i. Это число обычно обозначается через $\deg i$ и называется степенью вершины.

Кирхгоф показал [1], что справедливо следующее утверждение:

2.1. Матричная теорема о деревьях

Пусть G — связный помеченный граф с матрицей смежностей A. Тогда все алгебраические дополнения матрицы M равны между собой и их общее значение есть число остовов графа G.

Для графа, изображенного на рис. 4,

$$A=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad M=\begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}. \tag{2.8}$$

Все алгебраические дополнения матрицы M равны 8, т. е. числу остовов этого графа.

В комбинаторных расчетах удобнее иметь дело не с числом графов данного вида, а с их производящими функциями. Припишем каждому ребру графа, соединяющему вершины i и j, вес x_{ij}. Остов графа однозначно определяется произведением весов входящих в него ребер. Сумма таких произве-

дений по всем возможным остовам называется производящей функцией остовов $S(\{x\})$, где через $\{x\}$ обозначен набор всех весов графа. Положим вес каждого ребра x_{ij} равным проводимости участка цепи, входящей в определение (2.3) матрицы T. В этих терминах теорема Кирхгофа принимает следующий вид:

Для связного графа G все алгебраические дополнения матрицы T одинаковы и равны производящей функции остовов $S(\{x\})$. Чтобы понять связь между двумя формулировками теоремы, достаточно заметить, что матрицы M и T совпадают, если все $x_{ij} = 1$, а число остовов есть просто $S(\{1\})$.

Вернемся теперь к формуле (2.7) для сопротивления. Согласно матричной теореме, знаменатель $|T^{(l)}|$ есть производящая функция остовных деревьев $S(\{x\})$. Числитель $|T^{(k,l)}|$ равен коэффициенту при x_{kl} в разложении $S(\{x\})$, т. е.

$$|T^{(k,l)}| = \frac{\partial}{\partial x_{kl}} S(\{x\}). \tag{2.9}$$

Это означает, что $|T^{(k,l)}|$ при $x_{ij} = 1$ равно числу всех остовов, содержащих ребро kl. Тогда из формулы (2.7) и теоремы Кирхгофа следует интересный рецепт вычисления сопротивления системы одноомных проводников: для данной цепи нужно найти число остовных деревьев, содержащих ребро kl, и разделить его на число всех остовов. На рис. 4 мы видим, что первое число для ребра (1, 4) равно 4, а второе 8. Сопротивление между точками 1 и 4 $R_{1,4} = 1/2$. Если сопротивления не равны единице, для вычисления R_{kl} приходится находить соответствующую производную функцию.

Может возникнуть вопрос: а что делать, если точки k и l не соединены проводником? В этом случае проще всего поступить так: добавить в цепь известный проводник между точками k и l, найти сопротивление полученной цепи, а затем определить R_{kl} исходной цепи по формуле параллельного соединения проводников.

В классической работе [1] матричная теорема получена в неявном виде. Приведенная выше формулировка взята из книги Ф. Харари [17]. Там же имеется современное доказательство теоремы. Несмотря на краткость, оно далеко не элементарно. Поэтому мы дадим другое доказательство для читателя, более знакомого с моделью Изинга, чем с литературой по теории графов.

2.2. Доказательство матричной теоремы

Первая часть доказательства представляет собой упрощенный вариант комбинаторного решения модели Изинга [14].

Рассмотрим связный граф G с N вершинами, пронумерованными числами 1, 2, . . ., N. Как и выше, припишем ребру, соединяющему вершины i и j, вес x_{ij}. Обозначим через p замкнутый несамопересекающийся путь, проходящий некую последовательность вершин и ребер G, в которой все вершины различны. Определим вес $W(p)$ пути p как произведение всех весов содержащихся в нем ребер, взятое со знаком минус. Рассмотрим набор Γ замкнутых непересекающихся путей на графе G. Вес этого набора определим как

$$\chi(\Gamma) = \prod_p W(p), \tag{2.10}$$

где произведение берется по всем путям из набора Γ.

Обозначим через $\mathcal{P}$ произвольный замкнутый путь на G без ограничений на самопересечения. Его вес $W(\mathcal{P})$ определим подобно $W(p)$. Справедливо равенство

$$\prod_{\mathcal{P}} (1 + W(\mathcal{P})) = \sum_{\Gamma} \chi(\Gamma), \tag{2.11}$$

в котором произведение берется по всем возможным путям на графе, а сумма — по всем наборам замкнутых непересекающихся путей. Для того чтобы убедиться в справедливости этого равенства, раскроем произведение в левой части и заметим, что каждый член полученного ряда отвечает некоторому набору замкнутых путей. Если в наборе нет пересекающихся и самопересекающихся путей, то этот член дает вклад в правую часть. Если два пути p_1 и p_2 пересекаются в точке i, как показано на рис. 5, *а*, то найдется член, соответствующий одному самопересекающемуся в точке i пути, проходящему оба маршрута (рис. 5, *б*). Вес пары путей равен $W(p_1)\,W(p_2)$ и положителен, вес одного пути — $W(p_1)\,W(p_2)$. Таким образом, вклад от всех пересекающихся и самопересекающихся путей исчезает, и в левой части остается требуемая сумма.

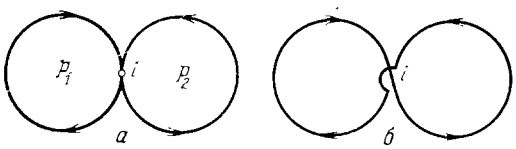

Рис. 5. *а* — Два пути, пересекающиеся в точке i; *б* — один самопересекающийся путь

Прологарифмируем обе части равенства (2.11) и, подобно тому как это делается при выводе статсуммы модели Изинга [14], напишем:

$$\ln \sum_{\Gamma} \chi(\Gamma) = \sum_{\mathcal{P}} \ln [1 + W(\mathcal{P})] = \sum_{\mathcal{P}} [1 - (-W(\mathcal{P}))] =$$

$$= -\sum_{\mathcal{P}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-W(\mathcal{P}))^j}{j} = -\sum_{r=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{N} \frac{W_r(i)}{r}, \qquad (2.12)$$

где через $W_r(i)$ обозначена сумма весов всех возможных замкнутых путей из r шагов, начинающихся и заканчивающихся в точке i. Вес этих путей снова равен произведению весов пройденных ребер, но уже с положительным знаком.

Продолжая аналогию, заметим, что сумма весов всех путей из точки i в точку j за r шагов $W_r(i, j)$ подчиняется следующему рекуррентному соотношению:

$$W_{r+1}(i, j) = \sum_k \Lambda(j, k)\, W_r(i, k), \qquad (2.13)$$

с $N \times N$-матрицей перехода Λ. Элементы $\Lambda(i, j)$ этой матрицы равны весу ребра x_{ij}, если вершины i и j смежны, и равны нулю в противном случае. Переход длины r определяется матрицей Λ^r, у которой диагональные элементы соответствуют возврату пути в исходную точку. Поэтому

$$\operatorname{Sp} \Lambda^r = \sum_{i=1}^{N} W_r(i). \qquad (2.14)$$

Обозначая через λ_n собственные значения матрицы Λ и учитывая равенства (2.12), можно написать:

$$\sum_{\Gamma} \chi(\Gamma) = \exp\left(-\sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \sum_{n=1}^{N} \lambda_n^r\right) =$$

$$= \exp\left[\sum_{n=1}^{N} \ln(1 - \lambda_n)\right] = \prod_{n=1}^{N} (1 - \lambda_n) = |I - \Lambda|, \qquad (2.15)$$

где I — единичная матрица порядка N.

Получив выражение для суммы $\sum \chi(\Gamma)$, мы можем сконструировать более полезный объект — «статистическую сумму» замкнутых путей с учетом

веса вершин. Для этого припишем каждой вершине i вес v_i ($i = 1, 2, \ldots, N$). Пусть набор замкнутых путей Г оставляет незанятыми часть вершин графа: $i_1, i_2, \ldots, i_k$. Введем произведение

$$\bar{\chi}(\Gamma) = v_{i_1} v_{i_2} \ldots v_{i_k} \chi(\Gamma) \tag{2.16}$$

и определим функцию

$$Z(\mathbf{v}, \{x\}) = \sum_{\Gamma} \bar{\chi}(\Gamma), \tag{2.17}$$

суммируя снова по всем наборам замкнутых путей. Выражение для $Z(\mathbf{v}, \{x\})$ легко получить, умножая $\sum \chi(\Gamma)$ на Πv_i и заменяя вес каждого ребра x_{ij} на x_{ij}/v_i. В каждом наборе сократятся все v_i в вершинах, занятых путями, и получится требуемое выражение для $\bar{\chi}(\Gamma)$. Фактор Πv_i можно ввести, умножая строку с номером i матрицы $(1 - \Lambda)$ на v_i. Тогда получим:

$$Z(\mathbf{v}, \{x\}) = \det(v_i \delta_{ij} - \Lambda(i, j)). \tag{2.18}$$

Здесь кончается аналогия с выводом статсуммы модели Изинга. Мы нашли «статсумму», в некотором смысле обратную той, которая требуется. Действительно, производящая функция Z перечисляет (со знаком минус) все возможные циклы на графе, а мы ищем производящую функцию остовов, т. е. подграфов, в которых нет ни одного цикла. Обращение задачи производится с помощью известного комбинаторного принципа включения — исключения.

2.3. Принцип включения — исключения

Пусть имеется N элементов и некоторое число свойств $p(1), p(2), \ldots, p(n)$. Пусть, далее, N_i — число элементов со свойством $p(i)$ и вообще $N_{i_1 i_2 \ldots i_r}$ — число элементов со свойствами $p(i_1), p(i_2), \ldots, p(i_r)$. Тогда число элементов $N(0)$, не обладающих ни одним из указанных свойств, задается формулой (см., например, [18]):

$$N(0) = N - \sum_i N_i + \sum_{i_1 < i_2} N_{i_1 i_2} + \ldots + (-1)^s \sum_{i_1 < i_2 < \ldots < i_s} + N_{i_1 i_2 \ldots i_s} \ldots$$
$$\ldots + (-1)^n N_{1\,2 \ldots n}. \tag{2.19}$$

Для того чтобы воспользоваться этой формулой, заметим, что аргументы $v_1, \ldots, v_N$ функции $Z(\mathbf{v}, \{x\})$ не входят в определение производящей функции $S(\{x\})$ и являются, фактически, свободными параметрами.

Положим

$$v_i = \sum_{j \neq i} x_{ij}, \qquad i = 1, 2, \ldots, N, \tag{2.20}$$

и рассмотрим почленно Z как сумму (2.17) по всем наборам замкнутых путей. Первый член возникает, когда набор Г пуст. Напишем его в явном виде:

$$\prod_{i=1}^{N} v_i = \prod_{i=1}^{N} \Big(\sum_{j \neq i} x_{ij}\Big). \tag{2.21}$$

Это выражение можно рассматривать как производящую функцию переходов между узлами при условии, что из каждого узла выходит единственный путь в один из смежных узлов графа. Обозначим через p_{ij} путь из узла i в смежный узел j. Последовательность $p_{i_1 i_2} p_{i_2 i_3} \ldots p_{i_{n-1} i_n}$ есть путь из узла i_1 в узел i_n. Если i_1 и i_n совпадают, путь замкнут. В производящую функцию (2.21) не входят самопересекающиеся пути, поскольку из каждой вершины выходит только один путь.

Пусть все возможные комбинации получающихся путей будут теми N элементами, о которых шла речь в формулировке принципа включения —

исключения. Тогда первый член $Z(\mathbf{v}, \{x\})$ соответствует первому члену в правой части формулы (2.19).

Свойствами $p(1), p(2), \ldots$ будем считать замкнутые пути, которые пронумерованы в произвольном порядке. Второй член Z представляет собой сумму по наборам Г, состоящим из одного замкнутого пути, и, по определению, вес пути отрицателен. Следовательно, этот член Z соответствует второму члену в формуле (2.19). Третий член Z есть сумма по наборам Г из двух замкнутых путей и имеет положительный знак. Продолжая эти рассуждения, мы получим полное соответствие между Z и левой частью (2.19) — суммой по всем комбинациям путей, не содержащих ни одного замкнутого пути.

Из полученного результата сразу следует, что после подстановки (2.20)

$$Z(\mathbf{v}, \{x\}) = \det\Big(\sum_{j\neq i} x_{ij} - \Lambda(i, j)\Big) = |T| = 0, \tag{2.22}$$

так как невозможно построить систему путей, выходящих из каждой вершины графа, не образующую ни одного замкнутого цикла. Рассмотрим теперь какое-нибудь алгебраическое дополнение T, скажем $|T^{(1)}|$. В матрице $T^{(1)}$ вычеркнуты первый столбец и первая строка, значит, в производящей функции $|T^{(1)}|$ не учитываются пути, проходящие через вершину 1. Разрешены только переходы в вершину 1 из смежных вершин $i_1, i_2, \ldots$ за счет диагональных элементов $T_{i_1 i_1}, T_{i_2 i_2}, \ldots$ Таким образом, вершина 1 оказывается точкой стока всех путей на графе G. Система путей проходит через каждую вершину и не содержит замкнутых циклов, поэтому она представляет собой остов. Следовательно, мы имеем

$$|T^{(1)}| = S(\{x\}). \tag{2.23}$$

В качестве точки стока может быть выбрана любая вершина G, поэтому все $|T^{(i)}|$ $(i = 1, 2, \ldots, N)$ равны. Кроме того, из равенства нулю суммы элементов в каждой строке и в каждом столбце матрицы T следует, что все остальные алгебраические дополнения также равны между собой. Теорема доказана.

3. ДИМЕРЫ И ОСТОВЫ

Рассмотрим задачу о димерах на плоской квадратной решетке, сформулированную в п. 1. Мы собираемся показать, что любую плотную упаковку димеров на этой решетке можно представить как остовное дерево на некоторой вспомогательной решетке, и отождествить таким образом статсумму димеров $\Lambda(x, y)$ с производящей функцией остовов $S(\{x\})$. Тогда выражение для $\Lambda(x, y)$ будет следовать из теоремы Кирхгофа.

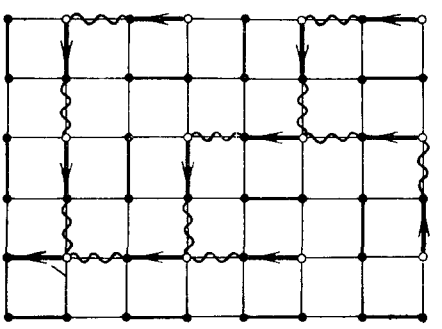

Рис. 6. Плотная упаковка димеров. Светлые кружки — точки подрешетки. Димеры, помеченные стрелками, и волнистые линии образуют остов на узлах подрешетки

Для простоты предположим, что оба числа M и N, определяющие размеры решетки, четны. Координаты узла обозначим парой целых чисел (k_1, k_2), $1 \leqslant k_1 \leqslant M$, $1 \leqslant k_2 \leqslant N$. Совокупность узлов, координаты которых принимают значения

$$\begin{aligned} k_1 &= 2m, \quad m = 1, 2, \ldots, \frac{M}{2}, \\ k_2 &= 2n, \quad n = 1, 2, \ldots, \frac{N}{2}, \end{aligned} \tag{3.1}$$

вместе с ребрами, соединяющими эти узлы, назовем подрешеткой L основной решетки. На рис. 6 узлы подрешетки L обозначены светлыми кружочками, остальные узлы — темными.

Рассмотрим произвольную плотную упаковку димеров на основной решетке. Часть димеров попадает на узлы подрешетки L (см. рис. 6). Снабдим каждый из этих димеров стрелкой, направленной от конца, лежащего на узле L, до другого конца. Из каждого узла L проведем путь в смежный узел L, указанный стрелкой. Простое наблюдение, позволяющее применить теорему Кирхгофа к задаче о димерах, заключается в том, что множество построенных путей образует на L остовное дерево.

Действительно, граф, образованный путями, содержит все узлы подрешетки L и, по определению, покрывает ее. Запрет на образование циклов возникает из-за того, что любой замкнутый контур на узлах L охватывает нечетное число точек основной решетки, и они не могут быть покрыты димерами. Убедиться в этом проще всего, рассуждая по индукции: элементарный квадрат на L заключает в себе одну точку основной решетки, а присоединение к имеющемуся контуру следующего квадрата увеличивает число охваченных точек на 2, 4 или 6 в зависимости от способа присоединения. Следовательно, граф, образованный путями — остов.

Для установления взаимооднозначного соответствия между остовами L и плотными упаковками необходимо еще убедиться в том, что любой остов, в свою очередь, порождает единственную конфигурацию димеров. Рассмотрим для этого все точки основной решетки, не принадлежащие к данному остову. Соединим ребрами все пары смежных вершин. Полученный граф также оказывается деревом, причем каждая его ветвь от свободного конца до точки присоединения к следующей имеет четную длину. Поэтому мы можем последовательно покрыть димерами все вершины дерева и поставить таким образом в соответствие каждому остову на L димерную упаковку на основной решетке. Единственность такого покрытия следует из построения.

Пусть теперь A — матрица смежностей подрешетки L, а M — соответствующая ей матрица с диагональными элементами $\deg i$. Тогда, согласно матричной теореме, число димерных покрытий, определенное в гл. 1, дается формулой:

$$F = |M'|, \tag{3.2}$$

где $|M'|$ — произвольное алгебраическое дополнение матрицы M

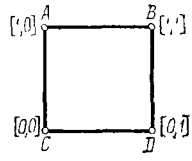

Рис. 7. Представление квадратной решетки в приведенных координатах

Прежде чем вычислять F в явном виде, получим еще выражение для производящей функции $\Lambda(x, y)$. Напомним, что x — это вес горизонтального, а y — вертикального димера. В дополнение к установленному соответствию между остовами L и плотными упаковками докажем чуть более тонкое свойство димерных покрытий.

Пусть в данной плотной упаковке димеров на узлы подрешетки L попадает m_L горизонтальных и n_L вертикальных димеров. Тогда в упаковке имеется еще m_L горизонтальных и n_L вертикальных димеров, так что их полное число есть

$$2m_L + 2n_L = \frac{MN}{2}. \tag{3.3}$$

Для доказательства определим приведенные координаты узла:

$$K_1 = k_1 \pmod 2, \qquad K_2 = k_2 \pmod 2. \tag{3.4}$$

Равенства (3.4) означают, что K_1 и K_2 равны 0 или 1 в зависимости от того, четны или нечетны числа $k_1/2$ и $k_2/2$. Рассмотрим квадрат ABCD с приведенными координатами $[K_1, K_2]$, показанными на рис. 7. Каждому димеру на основной решетке соответствует димер на квадрате. Например, горизонтальному димеру, попавшему на узел подрешетки L, соответствует димер на ребре CD, вертикальному — на ребре AC. Поскольку все узлы основной решетки

заняты, числа димеров, покрывающие точки A, B, C, D, равны. Если на ребре AC имеется n_L, а на ребре CD — m_L димеров, единственный способ добиться равенства числа димеров в вершинах квадрата — это добавить еще n_L димеров на ребро BD и m_L димеров на ребро AB. Отсюда следует упомянутое выше свойство.

Из набора весов $\{x\}$, входящих в определение производящей функции остовов $S(\{x\})$, удобно оставить, как и в случае димеров, только два: вес горизонтального ребра x и вертикального y. Пусть $g(m, n)$ есть число остовов подрешетки L с m горизонтальными и n вертикальными ребрами. В новых обозначениях производящая функция остовов принимает вид:

$$S(x, y) = \sum_{m, n} g(m, n) x^m y^n. \tag{3.5}$$

Каждое ребро остова проходит через димер, лежащий на узле L. Если в остове имеется m ребер с весом x и n ребер с весом y, то, согласно доказанному свойству, в плотной упаковке, связанной с этим остовом, имеется $2m$ горизонтальных и $2n$ вертикальных димеров. Числа упаковок и остовов совпадают, поэтому для производящей функции димеров $\Delta(x, y)$ получаем

$$\Lambda(x, y) = \sum_{m, n} g(m, n) x^{2m} y^{2n} = S(x^2, y^2). \tag{3.6}$$

Элементы матрицы T, определяемой условиями (2.3), при нашем выборе весов, имеют вид

$$T_{ij} = \begin{cases} 2x + 2y, & i = j, \\ -x, & i, j \text{ горизонтально смежны}, \\ -y, & i, j \text{ вертикально смежны}, \\ 0, & i, j \text{ не смежны}. \end{cases} \tag{3.7}$$

По теореме Кирхгофа $S(x, y)$ равно алгебраическому дополнению матрицы T, а выражение для $\Lambda(x, y)$ немедленно следует из равенства (3.6).

Приступим теперь к выводу формулы (1.7). Мы должны диагонализовать матрицу T, для чего нужно воспользоваться одним ее свойством, называемым цикличностью (см., например, [4]).

Матрица A порядка n называется циклической, если ее элементы $a(i, j)$ зависят только от разности $i - j$ и удовлетворяют условию $a(i + n) = a(i)$. Циклическая матрица диагонализуется с помощью ортогонального преобразования

$$B = R^{-1} A R, \tag{3.8}$$

где R — матрица с элементами

$$R(k, l) = n^{-1/2} e^{-(2\pi i/n) kl}. \tag{3.9}$$

Подставляя выражение (3.9) в формулу (3.8), имеем

$$B(j, k) = \sum_{l, s=1}^{n} R^{-1}(j, l)\, a(s - l)\, R(s, k) =$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{n} e^{(2\pi i/n)(k-j) l} \sum_{s=1}^{n} a(s - l)\, e^{(2\pi i/n)(s-l) k} = \delta_{jk} \lambda\left(\frac{2\pi j}{n}\right). \tag{3.10}$$

Вследствие периодичности $a(k)$ суммирование по s не зависит от l, поэтому

$$\lambda(\varphi) = \sum_{s=1}^{n} a(s)\, e^{is\varphi}. \tag{3.11}$$

Для определителя матрицы A получаем:

$$\det A = \det B = \prod_{j=1}^{n} \lambda\left(\frac{2\pi j}{n}\right). \tag{3.12}$$

Рассматриваемые нами матрицы зависят от положения точек i, j, которые, в свою очередь, задаются парой координат (k_1, k_2). В этом случае условие цикличности означает, что

$$\begin{gathered} a(\mathbf{j}, \mathbf{k}) = a(\mathbf{k} - \mathbf{j}), \\ a(\mathbf{k} + \mathbf{n}) = a(\mathbf{k}). \end{gathered} \tag{3.13}$$

Компонентами вектора $\mathbf{n}$ служат размеры решетки. Формулы (3.9)—(3.11) принимают вид

$$R(\mathbf{k}, \mathbf{l}) = (n_1 n_2)^{-1/2} e^{(2\pi i/n_1)(k_1 l_1)} e^{(2\pi i/n_2)(k_2 l_2)}, \tag{3.14}$$

$$B(\mathbf{j}, \mathbf{k}) = \delta_{j_1 k_1} \delta_{j_2 k_2} \lambda\left(\frac{2\pi j_1}{n_1}, \frac{2\pi j_2}{n_2}\right), \tag{3.15}$$

и

$$\lambda(\varphi) = \sum_{\mathbf{s}} a(\mathbf{s}) e^{i\mathbf{s}\varphi}. \tag{3.16}$$

Точно так же выглядят диагональные матричные элементы для векторов φ и $\mathbf{s}$ любой размерности. Выражение для определителя A аналогично (3.12):

$$\det A = \prod_{j_1=1}^{n_1} \prod_{j_2=1}^{n_2} \lambda(\varphi_1, \varphi_2). \tag{3.17}$$

В пределе больших n_1, n_2 можно положить $\varphi_1 = 2\pi j_1/n_1$, $\varphi_2 = 2\pi j_2/n_2$ и $d\varphi_1 = 2\pi/n_1$, $d\varphi_2 = 2\pi/n_2$. Тогда для $\det A$ получается асимптотическая формула

$$\frac{1}{n_1 n_2} \ln \det A = \\ = \frac{1}{n_1 n_2} \sum_{j_1=1}^{n_1} \sum_{j_2=1}^{n_2} \ln \lambda(\varphi_1, \varphi_2) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \ln \lambda(\varphi_1, \varphi_2)\, d\varphi_1\, d\varphi_2. \tag{3.18}$$

Этих общих рецептов теории циклических матриц достаточно для получения формулы (1.7). Во-первых, матрица T действительно является циклической из-за периодических граничных условий. Во-вторых, отличны от нуля только пять элементов $T(\mathbf{s})$ со следующими векторами $\mathbf{s}$: (0, 0), (1, 0), (—1, 0), (0, 1), (0, —1). Подставим их в выражение (3.16) для $\lambda(\varphi_1, \varphi_2)$:

$$\lambda(\varphi_1, \varphi_2) = T(0, 0) + T(1, 0) e^{i\varphi_1} + T(-1, 0) e^{-i\varphi_1} + \\ + T(0, 1) e^{i\varphi_2} + T(0, -1) e^{-i\varphi_2}, \tag{3.19}$$

или, с учетом (3.7),

$$\lambda(\varphi_1, \varphi_2) = 2x + 2y - xe^{i\varphi_1} - xe^{-i\varphi_1} - ye^{i\varphi_2} - ye^{-i\varphi_2}. \tag{3.20}$$

Вспоминая, что размеры подрешетки $n_1 = M/2$ и $n_2 = N/2$, и пользуясь формулой (3.18), получим [19]:

$$\ln \det T = \frac{MN}{4} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_0^{2\pi} \ln(2x + 2y - 2x\cos\varphi_1 - 2y\cos\varphi_2)\, d\varphi_1\, d\varphi_2. \tag{3.21}$$

Асимптотические выражения при больших M и N совпадают для детерминанта и алгебраического дополнения, поэтому выражение (3.21) дает $S(x, y)$.

Тогда соотношение (3.6) приводит к окончательному результату (1.7):

$$\ln \Lambda(x, y) = \frac{MN}{4\pi^2} \int\int_0^\pi \ln 2(x^2 + y^2 - x^2 \cos \varphi_1 - y^2 \cos \varphi_2)\, d\varphi_1\, d\varphi_2. \qquad (3.22)$$

Число димерных покрытий F получается из равенства (1.2).

Итак, в случае квадратной решетки мы убедились в том, что решение задачи о димерах непосредственно следует из теоремы Кирхгофа. Можно найти еще несколько решеток с такой же простой связью между димерными покрытиями и остовами. Однако не следует преувеличивать универсальность метода; например, для решетки, изображенной на рис. 2, проведенное построение уже невозможно. Преимущества сведения задачи о димерах к перечислению остовов обнаруживаются вполне только в трехмерном случае, к рассмотрению которого мы и переходим.

4. ДИМЕРЫ НА ТРЕХМЕРНЫХ РЕШЕТКАХ

Идея применения теоремы Кирхгофа к трехмерной задаче о димерах ясна: справедливость формулы для числа остовов не зависит от размерности, и если мы найдем остовы, которые однозначно определяют плотную упаковку, их перечисление уже не встретит затруднений. Вопрос состоит только в том, существуют ли такие остовы для трехмерных решеток? Ответ на него заранее не ясен, поскольку простые аргументы предыдущего раздела существенно опираются на планарность решетки. Ниже мы покажем, что существует по крайней мере одна решетка, близкая к структуре алмаза, для которой матричная теорема дает производящую функцию плотных упаковок.

Рассмотрим простую кубическую решетку, заключенную в параллелепипед с размерами $N_1 \times N_2 \times N_3$. Решетка образована точками с целочисленными координатами (k_1, k_2, k_3), принимающими значения $1 \leqslant k_i \leqslant N_i$, $i = 1, 2, 3$. Приведенные координаты точек обозначим через $[K_1, K_2, K_3]$, определяя их, как в п. 3:

$$K_i = k_i \pmod 2, \quad i = 1, 2, 3. \qquad (4.1)$$

Назовем множество точек с приведенными координатами [0, 0, 0] подрешеткой A, а множество точек с координатами [1, 1, 1] — подрешеткой B. Возьмем снова произвольную плотную упаковку димеров. Снабдим каждый из димеров, попавших на узел подрешетки A или B, стрелкой, направленной от конца, лежащего на узле подрешетки, до другого конца. Из каждого узла подрешетки A проведем путь в смежный узел A, указанный стрелкой. Так же поступим с подрешеткой B.

На подрешетках A и B возникли две системы направленных путей, G_a и G_b. В отличие от двумерного случая мы не можем утверждать, что все G_a и G_b — деревья, так как в трехмерном случае нет геометрических запретов на образование циклов. В дальнейшем мы найдем способ избавиться от циклов, а пока рассмотрим только такие G_a и G_b, которые образуют на подрешетках A и B остовные деревья. Два таких остова занимают половину узлов исходной решетки. Спрашивается, сколько существует способов покрыть оставшиеся точки димерами? Ответ на этот вопрос может показаться несколько неожиданным: для любых конфигураций остовов имеется ровно один способ дополнить решетку до плотной упаковки. Полное доказательство этого факта приведено в работе [20]. Здесь мы дадим лишь его набросок.

Для двух данных остовов на подрешетках A и B определим новый граф G, вершинами которого будут точки, не принадлежащие остовам, а ребрами — связи между смежными точками. Построим квадратную площадку размером 2×2 с узлами в точках подрешетки A. Если узел в центре площадки занят остовом, окрасим ее в черный цвет. Площадку со свободным центром будем считать белой. Рассмотрим множество всех белых площадок. Эти площадки

не могут ограничивать замкнутый объем, поскольку тогда окажется отрезанной часть остова B, который по определению связен. Тогда у набора белых площадок имеется граница — набор линий, проведенных по всем сторонам белых площадок, примыкающих к трем черным. На этой границе должна находиться по крайней мере одна точка G со степенью единица. Если степень точки больше единицы, то сторона, на которой эта точка находится, не принадлежит границе. Если степень всех точек на границе равна нулю, то вся граница принадлежит остову B. Но белые площадки образуют незамкнутую область, поэтому по ее границе можно провести замкнутую линию, а это противоречит определению остова.

Мы доказали, что в графе G есть по крайней мере одна точка со степенью единица. Эту и смежную с ней точку можно покрыть димером единственным образом. Останется граф G', который по тем же причинам содержит по крайней мере одну точку со степенью единица. Продолжая это построение, мы единственным образом покрываем димерами весь граф G.

Из доказанного факта сразу вытекает важное следствие. Пусть f — число всех остовов на подрешетке A (равное из-за симметрии числу остовов на подрешетке B). Очевидно, что точки, принадлежащие остовам, покрываются димерами единственным образом. Точки, не принадлежащие остовам, также покрываются единственным образом. Остовы на подрешетках A и B независимы. Поэтому для числа всех возможных димерных покрытий F справедливо неравенство

$$F \geqslant f^2. \tag{4.2}$$

Неучтенными остаются те упаковки димеров, для которых на подрешетках A и B возникает хотя бы один замкнутый путь. Оценка (4.2) дает нижнюю границу молекулярной свободы димера на кубической решетке. Найдем ее численное значение.

Матрица T для подрешеток A и B отличается от матрицы (3.7) только тем, что появляются дополнительные элементы $T_{ij} = -z$ для точек i и j смежных в направлении оси z, а диагональные элементы заменяются на $(2x + 2y + 2z)$. Подставим значения ненулевых матричных элементов в формулу (3.16):

$$\lambda(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) = 2x + 2y + 2z - 2x\cos\varphi_1 - 2y\cos\varphi_2 - 2z\cos\varphi_3. \tag{4.3}$$

Рассуждая точно так же, как и в двумерном случае, получим отсюда выражение для производящей функции остовов

$$S(x, y, z) = \exp\left[\frac{N_1N_2N_3}{8\pi^3}\int\int\int_0^\pi \ln 2(x+y+z- \right.$$
$$\left. -x\cos\varphi_1 - y\cos\varphi_2 - z\cos\varphi_3)\,d\varphi_1\,d\varphi_2\,d\varphi_3\right]. \tag{4.4}$$

Вспоминая, что

$$f = S(1, 1, 1), \tag{4.5}$$

из неравенства (4.2) и определения молекулярной свободы (1.5) получим:

$$\frac{1}{2}\ln\varphi \geqslant \frac{1}{4\pi^3}\int\int\int_0^\pi d\varphi_1\,d\varphi_2\,d\varphi_3 \ln\left(4\sum_{j=1}^{3}\sin^2\varphi_j\right) = 0{,}418347\ldots \tag{4.6}$$

Это известная оценка Хаммерсли [21]. Она довольно близка к принятому сейчас как наиболее надежному значению 0,446, вычисленному методом рядов [22]. Высокая точность оценки показывает, между прочим, что вклад от димерных покрытий с замкнутыми путями на подрешетках относительно мал.

Перейдем к основной цели этого раздела — выводу формулы для статсуммы димеров на трехмерной решетке. Мы уже видели выше, что на кубической решетке не возникает естественного запрета на образование циклов на подрешетках A и B. Введем этот запрет следующим образом.

Изменим систему весов димеров на кубической решетке. Если димер имеет вес x (или y), лежит на узле подрешетки A и ориентирован относительно этого узла в положительном направлении оси x (или y), заменим этот вес на x' (или y'). Если димер имеет вес x (или y), лежит на узле подрешетки B и ориентирован относительно него в отрицательном направлении оси x (или y), также заменим этот вес на x' (или y'). Остальные веса оставим без изменений. Положим теперь $x' = y' = 0$, т. е., другими словами, уберем из решетки все ребра, выходящие из узлов A в отрицательном направлении осей x и y, и все ребра, выходящие из узлов B в положительном направлении x и y. Элементарная ячейка полученной решетки изображена на рис. 8. Белым кружком обозначен узел подрешетки A, черным — узел подрешетки B. Штрихами обозначены отброшенные ребра исходной кубической решетки. Решетка типа алмаза (точнее, топологически эквивалентная ей решетка с координационным числом 4) получится, если в дополнение к отброшенным ребрам убрать из каждой элементарной ячейки ребра (2,7), (3,7), (4,6) и (4,8). В таких случаях говорят, что решетка алмаза декорирована дополнительными ребрами.

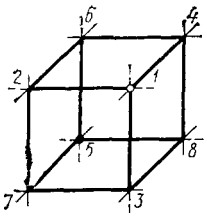

Рис. 8. Декорированная решетка алмаза.

Светлый кружок — узел подрешетки A, темный — узел подрешетки B. Штрихами обозначены отброшенные ребра кубической решетки

Посмотрим теперь, как выглядят пути на подрешетках A и B. Любой путь из узла A имеет четыре возможных продолжения и не содержит ни одного участка, направленного в положительном направлении осей x и y. Следовательно, система путей на подрешетке не содержит ни одного замкнутого цикла и является остовным деревом. По той же причине отсутствуют циклы на подрешетке B. Остовы на новой решетке являются частью множества всех остовов на кубической решетке и поэтому для точек, не принадлежащих к остовам, согласно доказанному свойству, существует единственное димерное покрытие. Тогда статсумма димеров получается из производящей функции остовов.

Если на узлы подрешеток A и B попали n_x, n_y и n_z димеров с весами x, y и z, то рассуждения, совершенно аналогичные проведенным в п. 3, показывают, что имеется еще n_x, n_y и n_z димеров с соответствующими весами.

Обозначим через $S_D(x, y, z)$ производящую функцию остовов на одной из подрешеток декорированной решетки алмаза. Из сказанного выше следует, что статсумма димеров на этой решетке $\lambda_D(x, y, z)$ имеет вид

$$\Lambda_D(x, y, z) = S_D^2(x^2, y^2, z^2). \tag{4.7}$$

Для вычисления $S_D(x, y, z)$ найдем матрицу T на подрешетке A. Из построения ясно, что отличны от нуля следующие элементы $T(\mathbf{s})$ этой циклической матрицы: $T(0, 0, 0) = x + y + 2z$; $T(-1, 0, 0) = x$; $T(0, -1, 0) = y$; $T(0, 0, 1) = z$; $T(0, 0, -1) = z$. Подстановка их в формулу (3.16) дает

$$\lambda(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) = x + y + 2z - xe^{-i\varphi_1} - ye^{-i\varphi_2} - 2z\cos\varphi_3, \tag{4.8}$$

откуда, действуя стандартным образом, получаем

$$S(x, y, z) = \exp\left[\frac{N_1N_2N_3}{8\pi^3}\int\int\int_0^\pi \ln(x + y + 2z - xe^{-i\varphi_1} - ye^{-i\varphi_2} - 2z\cos\varphi_3)\,d\varphi_1\,d\varphi_2\,d\varphi_3\right]. \tag{4.9}$$

Окончательный вид статсуммы следует из соотношения (4.7):

$$\Lambda_D(x, y, z) = \exp\left[\frac{N_1N_2N_3}{4\pi^3}\int\int\int_0^{\pi} \ln R(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)\, d\varphi_1\, d\varphi_2\, d\varphi_3\right], \qquad (4.10)$$

где

$$R(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) = 2x^4(1+\cos\varphi_1) + 2y^4(1+\cos\varphi_2) + 4z^4(1+\cos\varphi_3)^2 + \\ + 2x^2y^2(1+\cos\varphi_1+\cos\varphi_2+\cos(\varphi_1-\varphi_2)) + \\ + 2x^2z^2(1+\cos\varphi_1)(1+\cos\varphi_3) + 4yz(1+\cos\varphi_2)(1+\cos\varphi_3). \qquad (4.11)$$

Полагая $x = y = z = 1$, найдем значение молекулярной свободы φ по формулам (4.10) и (1.5). Численное интегрирование в (4.10) дает:

$$\varphi = 1{,}97526. \qquad (4.12)$$

В приближении Бете [12] для кубической решетки $\varphi = 2{,}41$, а для решетки алмаза $\varphi = 1{,}68$. Как и следовало ожидать, молекулярная свобода декорированной решетки алмаза находится между этими значениями.

Нам осталось рассмотреть важный вопрос о фазовых переходах в моделях димеров. Обе полученные выше статсуммы (1.7) и (4.10) аналитичны при всех положительных значениях своих аргументов и, следовательно, не дают фазового перехода. Можно заметить, что выражения под знаком логарифма в интегралах (1.7) и (4.10) всегда обращаются в нуль в точке минимума по переменным интегрирования в отличие, скажем, от модели Изинга, в которой это происходит только в критической точке. Это замечание дало повод Кастеляйну [23] утверждать, что модель димеров на квадратной решетке эквивалентна модели Изинга в критической точке. Возможно, такое утверждение справедливо и в трехмерном случае.

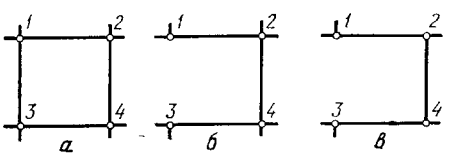

Рис. 9. *а* — Квадратная решетка; *б* — декорированная гексагональная решетка; *в* — гексагональная решетка

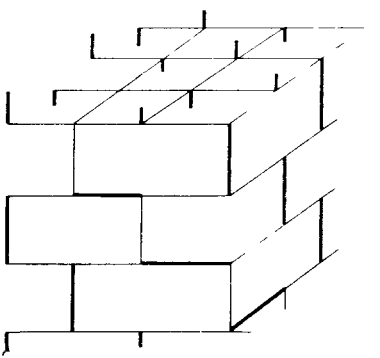

Рис. 10. Трехмерная модель димеров с фазовым переходом

Отсутствие фазовых переходов в рассмотренных моделях означает, что упорядочение димеров происходит непрерывным образом. Что нужно изменить в модели, чтобы в ней возник фазовый переход? Общего ответа на этот вопрос пока не существует, но сопоставление различных известных моделей позволяет вывести некоторые заключения. Первым примером димерной модели с фазовым переходом является решетка на рис. 2, эквивалентная модели Изинга. Эта модель имеет, как известно, логарифмическую расходимость теплоемкости в критической точке. На рис. 9 изображены четыре узла квадратной (*а*), декорированной гексагональной (*б*) и гексагональной (*в*) решеток. Статсумма модели димеров на всех трех решетках вычисляется методом пфаффиана, и оказывается, что в первых двух моделях нет фазовых переходов, в то время как третья статсумма дает критическую точку с корневой особенностью теплоемкости. Мы видим из этих примеров, что фазовый переход возникает, когда решетка становится достаточно разреженной или, что одно и то же, когда молекулярная свобода димера достаточно мала.

Точно так же в трехмерном случае для декорированной решетки алмаза нет фазового перехода, а отбрасывание лишних ребер и превращение ее в чистую решетку алмаза приводит к фазовому переходу. Доказать его существование можно, пользуясь, например, контурным методом Пайерлса [24], хотя при этом остается невыясненным характер особенности в критической точке.

Недавно в ряде статей [25-27] была рассмотрена задача о димерах на трехмерной решетке, изображенной на рис. 10. В работе [25] было найдено выражение для статсуммы со скачком теплоемкости в критической точке и объявлено, что этот результат является точным. Однако в работе [26] было показано, что скачок теплоемкости возник в результате приближения, аналогичного приближению Бете, а в работе [27] для этой модели была предсказана логарифмическая особенность теплоемкости. Если это предположение подтвердится, задача о димерах окажется первой моделью с близкодействием, для которой точно известно критическое поведение в трехмерном случае.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изложенный материал не нужно воспринимать как попытку датировать решение задачи о димерах XIX веком. По этому поводу напрашивается сентенция о том, что каждому результату свое время. С точки зрения догиббсовской физики задача о димерах — не более чем занятная головоломка. К тому же ее решение с помощью пфаффиана привело к созданию красивого и общего метода, позволяющего решить любую планарную задачу о димерах, не обязательно сводимую к перечислению остовов.

Более существенным представляется то, что теорема Кирхгофа позволяет продвинуться в решении трехмерных задач, где метод пфаффиана не работает или, по крайней мере, неясно, как его применять. Здесь приходится заметить, что ценность этих расчетов сильно снижается из-за аналитичности производящей функции остовов, которая ведет к отсутствию фазового перехода во всех решаемых таким способом моделях. Единственным практическим применением получаемых точных результатов остается проверка с их помощью различных приближенных методов и вычислительных алгоритмов в трехмерном случае.

Пока трудно сказать, какая из трехмерных моделей димеров наиболее перспективна для дальнейшего изучения. Некоторый оптимизм вызывают успехи в исследовании фазового перехода в модели, упомянутой в конце раздела 4. Эта модель интересна еще и тем, что структура возбуждений основного состояния в ней напоминает структуру вихрей в сверхтекучем He^4, и поиски строгого доказательства логарифмической особенности в критической точке [28] имеют дополнительные физические основания.

Кроме задачи о димерах, теорема Кирхгофа естественно применима к теории ветвящихся полимеров [19], если пользоваться решеточной картиной и отождествлять полимер с остовом данной решетки. Менее очевидная связь между теоремой Кирхгофа и пределом $n \to 0$ в n-компонентной модели Поттса была установлена в работе [29] (см. также обзор [30]).

Перечисленные примеры показывают, что теорема Кирхгофа представляет собой сильное комбинаторное утверждение, которое во многих случаях эквивалентно сложным вычислительным приемам современной статистической физики.

Объединенный институт ядерных исследований,
Дубна (Московская обл.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kirchhoff G.— Ann. Phys. und Chem., 1847, v. 72, p. 497.
2. Kasteleyn P. W.— Physica, 1961, v. 27, p. 1209; 1963, v. 29, p. 1329.
3. Temperley H. N. V., Fisher M. E.— Phil. Mag., 1961, v. 6, p. 1061.

4. Монтролл Э.— В кн.: Прикладная комбинаторная математика.— М.: Мир, 1968; в кн.: Устойчивость и фазовые переходы.— М.: Мир, 1973.
5. Шулепов Ю. В., Аксененко Е. В. Решеточный газ.— Киев: Наукова думка, 1981.
6. Green H. S., Hurst C. A. Order — Disorder Phenomena.— N.Y.: Interscience Publishers, 1964.
7. Baxendale J. H., Enustun B. V., Stern J.— Phil. Trans. Roy. Soc. **1951**, v. 243, p. 169.
Everett D. M., Penney M. F.— Proc. Roy. Soc., **1952**, v. 212, p. 164.
8. Guggenheim E. A. Mixtures.— Oxford: Clarendon Press, 1952.
9. Fowler R. H., Rushbrooke G. S.— Trans. Farad. Soc., **1937**, v. 33, p. 1272.
Chang T. S.— Proc. Roy. Soc. Ser. A, **1939**, v. 169, p. 512.
Miller A. R.— Proc. Cambr. Phil. Soc., **1943**, v. 39, p. 54.
Orr W. J. C.— Trans. Farad. Soc., **1944**, v. 40, p. 306.
10. Green H. S., Leipnik R.— Rev. Mod. Phys., **1960**, v. 32, p. 129.
11. Fisher M. E., Temperley H. N. V.— Ibid., p. 1029.
Katsura S., Inawashiro S.— Ibid., p. 1031.
12. Gaunt D. S.— Phys. Rev., **1969**, v. 179, p. 176.
13. Fan C., Wu F. Y.— Phys. Rev. Ser., B, **1970**, v. 2, p. 723.
14. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М.: Наука, 1976.
15. Hammersley J. M.— In: Research Papers in Statistics: Festschrift for Neyman/Ed. F. N. David.— N.Y.: J. Wiley and Sons, 1966.
16. Lieb E. H.— J. Math. Phys., **1967**, v. 8, p. 2339.
17. Харари Ф. Теория графов.— М.: Мир, 1973.
18. Холл М. Комбинаторика.— М.: Мир, 1970.
19. Temperley H. N. V.— Farad. Soc. Disc., **1958**, v. 25, p. 92.
20. Priezzhev V. B.— J. Stat. Phys., **1981**, v. 26, p. 917.
21. Hammersley J. M.— Proc. Cambr. Phil. Soc., **1968**, v. 64, p. 455.
22. Nagle J. F.— Phys. Rev., **1966**, v. 152, p. 190.
23. Kasteleyn P. W.— J. Math. Phys., **1963**, v. 4, p. 287.
24. Синай Я. Г. Теория фазовых переходов.— М.: Наука, 1980.
25. Izuyama T., Akutsy Y.— J. Phys. Soc. Japan, **1982**, v. 51, p. 50.
26. Kornilov E. I., Priezzhev V. B.— Zs. Phys. Ser. B, **1984**, Bd. 54, S. 351.
27. Bhattacharjee S. M., Nagle J. F., Huse D. A., Fisher M. E.— J. Stat. Phys., **1983**, v. 32, p. 361.
28. Rasetti M.— В кн.: Труды III международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики.— Дубна: ОИЯИ, 1984.
29. Fortuin C. M., Kasteleyn P. W.— Physica, **1972**, v. 57, p. 536.
20. Wu F. Y.— Rev. Mod. Phys., **1982**, v. 54, p. 235.