

530.162

**ПРОБЛЕМА СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДЕНИЙ
БЕЗ САМОПЕРЕСЕЧЕНИЙ***В. И. Алхимов*

(Московский областной педагогический институт им. Н.К. Крупской)

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	133
2. Феноменологический подход	135
3. Связь с теорией критических явлений	137
4. Континуальная модель и ренормгруппа	139
5. Основное уравнение	143
5.1. Ренормгрупповые уравнения. 5.2. Самоизбегающие блуждания в пространстве с размерностью $d \leq 4$.	
Заключение	159
Список литературы	159

1. Введение

Названная выше проблема возникла впервые в статистической физике линейных полимеров при вычислении их средних пространственных размеров. Линейные полимеры, как известно, представляют собой чрезвычайно длинные цепные молекулы (макромолекулы), число звеньев которых может достигать значений порядка $10^4 - 10^5$. К таким системам относятся как синтетические полимеры, так и биополимеры. Каждое звено линейного полимера обладает некоторой ориентационной свободой относительно положений соседних звеньев, что обуславливает гибкость полимерной цепи. Число степеней свободы у таких макромолекул очень велико и по порядку равно числу мономеров в них. Это позволяет рассматривать макромолекулу как макроскопическую систему и для определения средних значений величин, характеризующих, например, ее пространственные размеры, применять статистические методы. Многочисленные опытные факты показывают, что пространственное распределение мономеров макромолекулы относительно ее центра масс оказывает существенное влияние на такие макроскопические свойства полимерных растворов, как вязкость, диффузия, светорассеяние и другие. Наиболее важными величинами, характеризующими пространственные размеры макромолекул и измеряемыми на опыте, являются среднеквадратичное расстояние между концами макромолекулы и средний квадрат ее радиуса инерции.

Большое влияние на упомянутое выше распределение мономеров оказывает так называемый эффект "исключенного объема". Суть его заключается в том, что в одном и том же элементе объема пространства не может находиться одновременно более одного мономера. Учет влияния этого объемного эффекта на распределение плотности мономеров внутри макромолекулы и в конечном

итоге на ее размеры получил название: проблема "исключенного объема" в полимерных цепях. Эффект "исключенного объема" является эффектом дальнего порядка, поскольку он обусловлен взаимодействием мономеров с большими разностями их номеров на полимерной цепи. Но существует еще и эффект ближнего порядка, связанный со взаимодействием мономеров, соседних в цепной последовательности. Однако ведущую роль в формировании пространственной конфигурации макромолекулы играет эффект дальнего порядка.

Методы учета взаимодействия мономеров внутри макромолекулы в общих чертах аналогичны методам, используемым в теории реальных газов. Однако цепочечная структура макромолекулы приводит к резкому отличию поведения ее мономеров от поведения молекул газа. Действительно, вероятность столкновения двух мономеров будет зависеть не только от расстояния по цепи между ними, но и от их совместного положения на цепи; другими словами, эта вероятность зависит от порядковых номеров мономеров в их цепочечной последовательности. Таким образом, неразличимость, существующая для одинаковых молекул газа, не имеет места для мономеров макромолекулы. Вместе с тем структура линейной полимерной цепи позволяет использовать идеи и методы теории случайных блужданий броуновской частицы. Именно цепочечный характер траектории блуждающей частицы и линейного полимера является главным свойством, на котором основана аналогия в описании этих систем. Но в теории полимеров необходимо учитывать эффект "исключенного объема". В терминах теории случайных блужданий этот эффект означает запрет блуждающей частицы пересекать свою траекторию. В связи с этим проблему "исключенного объема" в линейных полимерах иногда называют проблемой случайных блужданий без самопересечений (СББС). В этом случае мы имеем дело с немарковским процессом, поскольку блуждающая частица должна избегать те участки пространства, которые она посещала во все предыдущие моменты времени, т.е. должна помнить весь свой путь. Наличие "памяти" в рассматриваемой проблеме наделяет последнюю исключительными свойствами, не имеющими аналогов среди известных физических задач. Основной величиной в проблеме СББС принято считать плотность вероятности $W_N(\mathbf{R})$ распределения вектора \mathbf{R} , соединяющего концы траектории, состоящей из N ($N \gg 1$) отдельных перемещений блуждающей частицы. Определение функции $W_N(\mathbf{R})$ позволило бы сразу получить важную пространственную характеристику траектории — среднеквадратичное расстояние $\langle R^2 \rangle_N$ между ее концами. Классический результат для $\langle R^2 \rangle_N$, полученный Флори [1] из термодинамической теории полимерных растворов, гласит

$$\langle R^2 \rangle_N \sim \text{const} \cdot (v_0/l^3)^{2/5} N^{6/5} l^2, \quad (1.1)$$

где v_0 — "исключенный объем" мономера, а l — длина одного звена, соединяющего два соседних мономера. Обобщение формулы Флори (1.1) на случай произвольной пространственной размерности d впервые было предложено Фишером [2] в таком виде:

$$\langle R^2 \rangle_N \sim \text{const} \cdot (v_0/l^d)^{2\nu/3} N^{2\nu} l^2, \quad (1.2)$$

где критический показатель ν принимает следующие значения:

$$\nu = \frac{3}{d+2}, \quad \text{если } d < 4,$$

$$= \frac{1}{2}, \quad \text{если } d > 4. \quad (1.3)$$

Размерность $d = 4$, как следует из (1.3), оказывается выделенной в том смысле, что в случае $d > 4$ величина $\langle R^2 \rangle_N$ асимптотически зависит от N так же, как и при отсутствии "исключенного объема", т.е.

$$\langle R^2 \rangle_N \sim O(Nl^2). \quad (1.4)$$

Многочисленные опытные факты, а также результаты, полученные для $\langle R^2 \rangle_N$ с помощью ЭВМ, хорошо согласуются с формулой (1.2). Простой вывод этой формулы можно изложить следующим образом.

2. Феноменологический подход

Рассмотрим формально в d -мерном евклидовом пространстве \mathbf{R}^d линейную полимерную цепь из $N + 1$ мономеров, свободно сочлененных между собой N звеньями с длиной каждого звена, равной l . Пронумеруем все мономеры и звенья в порядке их расположения на цепи, а нулевой мономер совместим с началом системы координат в \mathbf{R}^d . Звенья удобно рассматривать как векторы \mathbf{l}_i ($|\mathbf{l}_i| = l$, $i = 1, 2, \dots, N$), полагая при этом, что вектор \mathbf{l}_i направлен от $i - 1$ -го мономера к i -му мономеру. Взаимодействие между любыми двумя мономерами, соединенными между собой более чем одним звеном, будем описывать при помощи короткодействующего потенциала отталкивания $U(R)$ с радиусом действия r_0 , не превышающим длину звена, т.е. $r_0 < l$. Тогда

$$v_0 = \int (1 - e^{-U(R)/kT}) d^d R$$

обозначает величину "исключенного объема" мономера. В простейшем случае мономер можно считать абсолютно твердым шаром с диаметром r_0 .

Далее обозначим посредством

$$U_N = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \sum U(\mathbf{L}_{ij})$$

потенциальную энергию полимерной цепи, где вектор

$$\mathbf{L}_{ij} = \sum_{i \leq m \leq j} \mathbf{l}_m$$

соединяет геометрические центры $i - 1$ -го и j -го мономеров. Тогда средний квадрат расстояния между $i - 1$ -м и j -м мономерами можно записать как

$$\langle L_{ij}^2 \rangle = (j - i + 1)l^2 + 2l^2 \sum_{i \leq m < n \leq j} \langle \cos \theta_{mn} \rangle, \quad (2.1)$$

где θ_{mn} — угол между направлениями векторов \mathbf{l}_m и \mathbf{l}_n ,

$$\langle \cos \theta_{mn} \rangle = Q_N^{-1} \int (\mathbf{e}_m \mathbf{e}_n) e^{-U_N/kT} \prod_{i=1}^N d\Omega_i, \quad (2.2)$$

Q_N — нормировочный множитель, равный

$$Q_N = \int e^{-U_N/kT} \prod_{i=1}^N d\Omega_i,$$

$(\mathbf{e}_m \mathbf{e}_n)$ — скалярное произведение векторов $\mathbf{e}_m = \mathbf{l}_m/l$ и $\mathbf{e}_n = \mathbf{l}_n/l$, $d\Omega = \omega^{-1} d\omega$, $d\omega$ — элемент поверхности сферы единичного радиуса в R^d , $\omega = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ — величина полной поверхности этой сферы, $\Gamma(x)$ — гамма-функция Эйлера. Величину $\langle \cos \theta_{mn} \rangle$ можно рассматривать как меру корреляции между направлениями векторов \mathbf{l}_m и \mathbf{l}_n , обусловленной эффектом "исключенного объема". Очевидно, что в случае $U(R) \equiv 0$ и, следовательно, $v_0 = 0$, имеем: $\langle \cos \theta_{mn} \rangle = 0$. Естественно ожидать, что $\langle \cos \theta_{mn} \rangle > 0$, когда $v_0 > 0$, т.е. объемные эффекты приводят к увеличению среднеквадратичного расстояния между мономерами полимерной цепи. Например, для $d = 1$ очевидно, что $\langle \cos \theta_{mn} \rangle = 1$ и, стало быть, согласно равенству (2.1) мы имеем $\langle L_{ij}^2 \rangle = (j - i + 1)^2 l^2$, т.е. полимерная цепь полностью вытянута. В том случае, когда $d \geq 2$, полимерную цепь можно рассматривать в среднем как клубок, пространственные размеры которого описываются при помощи всего лишь одной величины — среднеквадратичного расстояния между его концами $\langle L_{1N}^2 \rangle$.

С помощью равенства (2.1) составим разностное соотношение

$$\langle L_{ij}^2 \rangle - \langle L_{i+1j}^2 \rangle - \langle L_{ij-1}^2 \rangle + \langle L_{i+1j-1}^2 \rangle = 2l^2 \langle \cos \theta_{ij} \rangle \quad (2.3)$$

и рассмотрим его при таких значениях i и j ($1 \leq i < j \leq N$), для которых величина $t \equiv j - i + 1$ много больше единицы. Но в таком случае значения $\langle \cos \theta_{ij} \rangle$ должны быть много меньше единицы и убывать с ростом t , ибо в противном случае из (2.1) следовало бы, что $\langle L_{1N}^2 \rangle \sim N^2 l^2$, т.е. полимерная цепь вытянута. Отсюда можно сделать вывод, что безразмерная величина $\langle \cos \theta_{ij} \rangle$ должна зависеть от какого-то безразмерного малого параметра, зависящего по крайней мере от v_0/l^d и t . Когда $t = N$, в качестве малого параметра естественно взять отношение суммы "исключенных объемов" всех N мономеров к среднему объему, занимаемому полимерной цепью, т.е.

$$\epsilon_N = v_1 N / 2 \langle L_{1N}^2 \rangle^{d/2}, \quad (2.4)$$

где $v_1 = c_d v_0$, а коэффициент $c_d = (d/2\pi)^{d/2}$, характеризующий пространственную форму клубка, определяется из теории возмущений для $\langle R^2 \rangle_N \equiv \langle L_{1N}^2 \rangle$:

$$\langle R^2 \rangle_N / N l^2 = 1 + 4(d/2\pi l^2)^{d/2} v_0 N^{(4-d)/2} / (4-d)(6-d) + \dots$$

Когда $t < N$, корреляция между направлениями векторов l_i и l_j обусловлена не только "внутренними" мономерами (с номерами от $i - 1$ до j), но и "внешними" мономерами (с номерами от 0 до $i - 2$ и от $j + 1$ до N). Влияние "внешних" мономеров на корреляцию между векторами l_i и l_j исходит как от взаимодействия с "внутренними" мономерами, так и от их взаимодействия между

собой. Однако при стремлении величины t к N число "внешних" мономеров убывает и при значениях t , достаточно близких к N , их влиянием на корреляцию между l_i и l_j можно вовсе пренебречь. Таким образом, при $t \sim N$ мы будем считать, что в первом порядке по малому параметру

$$\varepsilon_t = \frac{v_1 t}{2\langle L_{ij}^2 \rangle^{d/2}} \quad (2.5)$$

имеет место равенство

$$\langle \cos \theta_{ij} \rangle = \varepsilon_t. \quad (2.6)$$

Аппроксимируя теперь разностное соотношение (2.3) дифференциальным уравнением, мы получим для величины $y(t) \equiv \langle L_{ij}^2 \rangle / t^2$ уравнение

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{v_1}{t^d} \frac{t}{y^{d/2}}, \quad (2.7)$$

асимптотическое решение которого при $t \rightarrow \infty$ единственно и для $d < 4$ имеет следующий вид [3]:

$$y(t) \sim \left[\frac{(d+2)^2 v_1}{6(4-d)t^d} \right]^{2\nu/3} t^{2\nu}. \quad (2.8)$$

Тогда, используя формулу (2.8) в равенствах (2.5) и (2.6), находим

$$\langle \cos \theta_{ij} \rangle \sim \frac{1}{2} \left[\frac{6(4-d)v_1}{(d+2)^2 t^d} \right]^{\nu d/3} t^{-2\nu(d-1)/3}. \quad (2.9)$$

Наконец, в случае $d > 4$ асимптотическое решение уравнения (2.7) при $t \rightarrow \infty$ имеет вид $y(t) \sim O(t)$ и, следовательно,

$$\langle \cos \theta_{ij} \rangle \sim O(t^{-(d-2)/2}).$$

Таким образом, эффект "исключенного объема" приводит к степенному закону убывания корреляции между направлениями двух звеньев полимерной цепи l_i и l_j с увеличением $t = j - i + 1$, а именно: $\langle \cos \theta_{ij} \rangle \sim O(t^{-\alpha})$, где $\alpha < 1$ для $d < 4$ и $\alpha > 1$ для $d > 4$.

3. Связь с теорией критических явлений

Полученные в начале 70-х годов важные результаты в теории фазовых переходов существенным образом продвинули понимание природы критических явлений, что в свою очередь оказало заметное влияние и на развитие статистической физики полимеров [4, 5]. Для вычисления критических показателей, определяющих степень сингулярности различных термодинамических величин в точке фазового перехода, в работах Вильсона [6, 7] был развит ренормгрупповой (РГ) метод. Идейную основу метода Вильсона составляет так называемая гипотеза универсальности Каданова [8], согласно которой критические показатели должны быть нечувствительными к деталям поведения потенциала взаимодействия, а определяются главным образом

крупномасштабными свойствами, такими, как размерность системы и симметрия ее гамильтониана (см. также [9]). Центральное место в теории Вильсона занимает предположение (гипотеза подобия или скейлинга) о степенном законе убывания корреляционной функции системы, например, магнетика с ростом расстояния между двумя его элементарными магнитными моментами в точке фазового перехода. Для вычисления значений критических показателей Вильсон и Фишер [10] выдвинули идею ϵ -разложения по параметру $\epsilon = 4 - d$ отклонения размерности пространства d от размерности $d = 4$. Размерность $d = 4$ в этой теории оказалась выделенной в том смысле, что при вычислении критических показателей, когда $d > 4$, можно использовать теорию возмущений. Процедура ϵ -разложения позволяет определить значения критических показателей в виде степенных рядов по ϵ . Как показывают вычисления, коэффициенты таких рядов сначала убывают, но затем начинают быстро возрастать, что указывает, по-видимому, на асимптотический характер ϵ -рядов. Таким образом, РГ метод эффективен пока лишь для размерностей пространства вблизи $d = 4$, хотя физический смысл имеют только целочисленные значения d .

В проблеме СББС метод Вильсона впервые был использован в работе де Жена [11]. Суть подхода де Жена состоит в установлении аналогии в поведении n -компонентного магнетика вблизи точки фазового перехода и случайно блуждающей без самопересечений частицы, когда число отдельных ее перемещений N стремится к бесконечности. Для определения главной характеристики магнетика — его корреляционной функции — используется стандартная диаграммная техника, основанная на разложении гиббсовской экспоненты в бесконечный ряд по степеням гамильтониана взаимодействия (обычно выбираемого в форме, используемой в модели Гинзбурга—Ландау) и последующем усреднении каждого члена ряда по гиббсовской экспоненте с невозмущенным гамильтонианом [12]. Аналогом корреляционной функции магнетика в проблеме СББС служит величина, полученная в результате преобразования Лапласа по N плотности вероятности $W_N(\mathbf{R})$. Однако среди диаграмм, представляющих корреляционную функцию магнетика, имеются такие диаграммы, которые содержат замкнутые петли, связанные с остальными частями диаграммы только линиями взаимодействия. Вместе с тем все диаграммы в проблеме СББС должны быть односвязны по основной линии просто в силу односвязности траектории блуждающей частицы. Чтобы исключить замкнутые петли в диаграммах n -компонентного магнетика и тем самым достичь формальной аналогии между двумя задачами, необходимо, оказывается, положить $n = 0$. В этом и состоит один из важных результатов де Жена. Отсюда тогда следует, что для определения, например, показателя степени в асимптотической формуле $\langle R^2 \rangle_N \sim N^{2\nu} l^2$, когда $N \rightarrow \infty$, а $\epsilon \ll 1$ можно воспользоваться выражением для ν , полученным методом Вильсона [12], и затем параметр n устремить к нулю. В результате имеем

$$2\nu = 1 + c_1\epsilon + c_2\epsilon^2 + c_3\epsilon^3 + \dots, \quad (3.1)$$

где $c_1 = 1/8$, $c_2 = 15/256$, $c_3 = -0,0445 \dots, \dots$

Для реализации РГ метода Вильсона в проблеме СББС можно воспользоваться ренормировочными преобразованиями непосредственно в виде так называемой процедуры децимации [13] (см. также [4] и [14]). Согласно последней полимерная цепь из N звеньев разбивается на $N_1 = N/g$ одинаковых блоков, содержащих по g звеньев, последовательно соединенных между собою.

Каждый такой блок теперь рассматривается как новое эффективное звено с новыми значениями его длины l_1 и величины "исключенного объема" v_1 . Для определения l_1 необходимо учесть взаимодействия всех мономеров, принадлежащих одному блоку, а для нахождения v_1 следует учесть как взаимодействие между двумя блоками, удаленными достаточно далеко друг от друга вдоль цепи, так и все взаимодействия внутри каждого из них. В результате мы получим полимерную цепь с новыми параметрами: N_1, l_1, v_1 , зависящими от исходных значений N, l и v . Эта процедура группирования звеньев в блоки затем многократно повторяется, и на каждом k -м этапе необходимо определять ренормированные значения l_k и v_k . Связь между двумя последовательными шагами в этом процессе описывается рекуррентными соотношениями для l_k и v_k или для безразмерной величины $u_k = v_k/l_k^d$: $u_k = f(u_{k-1})$. При $k \rightarrow \infty$ последовательность чисел u_k сходится к некоторому предельному значению u^* — корню уравнения: $u^* = f(u^*)$, что как раз и является отражением гипотезы универсальности. В количественном отношении этот подход реализован только в случае $\epsilon \ll 1$, а результат для v в первом порядке по ϵ совпадает с выражением (3.1). Более подробно тема этого раздела изложена в монографиях [4] и [14].

Описанный здесь итерационный процесс связывается обычно с введенной Вильсоном ренормализационной группой, которая на самом деле является полугруппой, поскольку для указанных выше итераций невозможно определить обратные операции. Вместе с тем для прямого изучения статистики полимеров существуют и такие схемы ренормировочных преобразований, которые связаны с истинной группой, называемой тоже ренормализационной группой. Последняя впервые была обнаружена в квантовой теории поля Штюкельбергом и Петерманом [15], а затем Гелл-Манном и Лоу [16]. В дальнейшем РГ метод был развит в работах Боголюбова и Ширкова [17, 18]. Чтобы отличить эту (истинную) группу ренормировочных преобразований от ренормгруппы Вильсона, ее называют обычно полевой ренормгруппой. Следует отметить, что полевая ренормгруппа является непрерывной группой и поэтому, как известно, она может быть описана дифференциальными уравнениями Ли, чрезвычайно полезными для практических целей. В дальнейшем оказалось, что и полевой РГ метод может быть включен в различные схемы исследования проблемы СББС. В следующем разделе мы кратко изложим континуальный подход к рассматриваемой проблеме.

4. Континуальная модель и ренормгруппа

Формулировка проблемы "исключенного объема" в терминах метода континуального интегрирования была дана впервые в известной работе Эдвардса [19]. Последняя инициировала интенсивное развитие такого подхода к этой проблеме в многочисленных работах (см., например, [20 — 35]).

В континуальной модели полимерной цепи число ее звеньев устремляют к бесконечности, а эффективную длину каждого звена Δs_i ($i = 1, 2, \dots, N$) устремляют к нулю таким образом, чтобы общая контурная длина L цепи оставалась конечной величиной, т.е.

$$L = \lim \sum_{i=1}^N \Delta s_i < \infty, \quad \max \Delta s_i \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty.$$

При этом плотность распределения вектора $\mathbf{R}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}$, соединяющего два соседних вдоль цепи мономера, расположенных в точках \mathbf{r}_{i-1} и \mathbf{r}_i , описывается гауссовой функцией

$$\tau(\mathbf{R}_i) = (3/2\pi l \Delta s_i)^{3/2} \exp(-3\mathbf{R}_i^2/2l\Delta s_i), \quad (4.1)$$

в которой величина l , называемая куновской длиной, определена так, чтобы средний квадрат расстояния между концами идеальной полимерной цепи (т.е. в отсутствие "исключенного объема") был равен lL . Если теперь обозначить потенциал объемного взаимодействия между i -м и j -м мономерами через $U_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, то распределение вектора \mathbf{R} , соединяющего концы цепи, можно записать в следующем виде:

$$W_N(\mathbf{R}) = Z_N^{-1} \int \exp\left(-\frac{1}{2kT} \sum_{i \neq j} U_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\right) \times \\ \times \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}_N + \mathbf{r}_0) d^3 r_0 \prod_{i=1}^N \tau(\mathbf{R}_i) d^3 r_i, \quad (4.2)$$

где

$$Z_N = \int \exp\left(-\frac{1}{2kT} \sum_{i \neq j} U_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\right) d^3 r_0 \prod_{i=1}^N \tau(\mathbf{R}_i) d^3 r_i. \quad (4.3)$$

Далее выполняется предельный переход к континуальной модели линейного полимера указанным выше способом. В результате этого любая допустимая пространственная конфигурация полимера может быть представлена уравнением непрерывной кривой $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s)$, в котором координата s точки кривой изменяется в пределах от 0 до L . В этом случае конечные суммы, фигурирующие в равенствах (4.2) и (4.3), переходят в интегралы:

$$\sum_{i=1}^N \frac{3}{2l} \left(\frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}}{\Delta s_i} \right)^2 \Delta s_i \rightarrow \frac{3}{2l} \int_0^L \left(\frac{d\mathbf{r}(s)}{ds} \right)^2 ds, \\ \frac{1}{2kT} \sum_{i \neq j} U_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rightarrow \frac{1}{2kTl^2} \int_0^L ds \int_0^L ds' U(\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}(s')),$$

здесь величина U_{ij}/l^2 интерпретируется как энергия взаимодействия i -го и j -го мономеров, приходящаяся на единицы длин их звеньев. Следующий шаг состоит в замене потенциала U на псевдопотенциал согласно следующей схеме:

$$(kT)^{-1} U(\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}(s')) \rightarrow v_0 \delta(\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}(s')),$$

в которой величина v_0 играет роль "исключенного объема" мономера. При этом во избежание сингулярности область интегрирования по s и s' ограничивают условием: $|s - s'| > \lambda$, где параметру λ придают значение порядка длины звена l .

Наконец, если континуальную модель полимера рассматривать в d -мерном пространстве и для простоты положить $l = 1$, то плотность распределения вектора \mathbf{R} примет вид

$$W(\mathbf{R}, L) = Z^{-1}(L)G(\mathbf{R}, L), \quad (4.4)$$

где

$$Z(L) = \int G(\mathbf{R}, L) d^d R, \quad (4.5)$$

$$G(\mathbf{R}, L) = \left[\int_{\mathbf{r}(0)=0}^{\mathbf{r}(L)=\mathbf{R}} D[\mathbf{r}(s)] \exp(-H_0(\mathbf{r})) \right]^{-1} \times \\ \times \int_{\mathbf{r}(0)=0}^{\mathbf{r}(L)=\mathbf{R}} D[\mathbf{r}(s)] \exp(-H(\mathbf{r})), \quad (4.6)$$

$$H_0(\mathbf{r}) = \frac{d}{2} \int_0^L \left(\frac{d\mathbf{r}(s)}{ds} \right)^2 ds,$$

$$H(\mathbf{r}) = H_0(\mathbf{r}) + \frac{v_0}{2} \int \int_{|s-s'| > \lambda} ds ds' \delta(\mathbf{r}(s) - \mathbf{r}(s')),$$

а $D[\mathbf{r}(s)]$ обозначает меру на множестве конфигураций непрерывной кривой, концы которой находятся в точках: $\mathbf{r}(0) = 0$ и $\mathbf{r}(L) = \mathbf{R}$.

Из определения рассматриваемой здесь модели нетрудно видеть, что она теряет смысл на расстояниях порядка λ . Это обстоятельство вынуждает перейти к макроскопическому способу ее описания, т.е. на расстояниях, много больших чем λ . Поэтому помимо λ в теорию вводится новый масштабный параметр длины Λ такой, что $\lambda/\Lambda \ll 1$. Введение новой шкалы длин, в которой макроскопическая длина цепи L , вообще говоря, не совпадает с ее микроскопической длиной L , позволяет использовать в этой модели гипотезу универсальности, когда $L \rightarrow \infty$.

В самом деле, если, например, удвоить значение L , то, очевидно, удвоится и значение L . Это означает, что между величинами L и L должна существовать линейная связь:

$$\tilde{L} = XL, \quad (4.7)$$

в которой коэффициент X зависит от "исключенного объема" v_0 и отношения λ/Λ . В новой шкале длин величина, описывающая эффект "исключенного объема", должна отражать коллективный характер объемных взаимодействий на расстояниях порядка Λ . Поэтому в роли макроскопического "исключенного объема" здесь выступает его ренормированная величина u , зависящая, разумеется, от v_0 и λ/Λ . При вычислении критических показателей, однако, более удобно оперировать величинами

$$u_0 = v_0 \Lambda^{\varepsilon/2}, \quad u = v \Lambda^{\varepsilon/2},$$

и тогда, учитывая вышесказанное, можно написать

$$u = u(u_0, \lambda/\Lambda). \quad (4.8)$$

Наконец, обозначим посредством $G_0(\mathbf{R}, L, v_0; \lambda)$ и $G(\mathbf{R}, \tilde{L}, u; \Lambda)$ ненормированные функции распределения вектора \mathbf{R} соответственно при микро- и макроскопическом подходах к данной проблеме. Но так как после нормировки каждой из функций G_0 и G в результате должна получиться одна и та же плотность распределения вектора \mathbf{R} , то, очевидно, величины G_0 и G должны быть пропорциональны друг другу:

$$G(\mathbf{R}, \tilde{L}, u; \Lambda) = Y^{-1}(u, \lambda/\Lambda)G_0(\mathbf{R}, L, v_0; \lambda). \quad (4.9)$$

Соотношения (4.7) — (4.9) составляют основу для применения РГ метода в континуальной модели линейной полимерной цепи.

Действительно, перепишем равенство (4.9) в виде

$$G_0(\mathbf{R}, L, v_0; \lambda) = Y(u, \lambda/\Lambda) \times \\ \times G(\mathbf{R}, LX(u, \lambda/\Lambda), u(u_0, \lambda/\Lambda); \Lambda) \quad (4.10)$$

и примем во внимание, что левая часть последнего равенства не зависит от параметра Λ . Отсюда тогда немедленно следует дифференциальное уравнение для функции $G(\mathbf{R}, L, u; \Lambda)$:

$$\left(\Lambda \frac{\partial}{\partial \Lambda} + \beta(u) \frac{\partial}{\partial u} + \Lambda \frac{\partial \ln Y}{\partial \Lambda} + \right. \\ \left. + \Lambda \frac{\partial \ln X}{\partial \Lambda} \tilde{L} \frac{\partial}{\partial \tilde{L}} \right)_{L, v_0, \lambda} G(\mathbf{R}, \tilde{L}, u; \Lambda) = 0, \quad (4.11)$$

в котором

$$\beta(u) = \Lambda \frac{\partial u}{\partial \Lambda} \Big|_{L, v_0, \lambda} \quad (4.12)$$

обозначает функцию Гелл-Манна—Лоу. Уравнение (4.11), называемое РГ уравнением, содержит информацию о функциональной зависимости искомой величины G от макроскопических параметров данной модели. Если с ростом значений параметра Λ величина u перестает зависеть от Λ , т.е. рассматриваемая система асимптотически обладает свойством масштабной инвариантности, то это дает основание для реализации идеи скейлинга. Предельное значение u^* величины u , называемое неподвижной точкой, находится из условия

$$\beta(u) \Big|_{u=u^*} = 0. \quad (4.13)$$

Используя последнее равенство в уравнении (4.11), можно существенно упростить вычисление критических показателей. В самом деле, размерный анализ решения РГ уравнения в режиме скейлинга приводит к следующей его асимптотике

$$G(\mathbf{R}, \tilde{L}, u^*; \Lambda) \sim \tilde{L}^{-\nu d - 1} g(\mathbf{R}/\tilde{L}^\nu), \quad (4.14)$$

в которой критические показатели ν и γ находятся из формул

$$\frac{2\nu - 1}{2\nu} = \Lambda \frac{\partial \ln X}{\partial \Lambda} \Big|_{u=u^*}, \quad (4.15)$$

$$\frac{\gamma - 1}{2\nu} = \Lambda \frac{\partial \ln Y}{\partial \Lambda} \Big|_{u=u^*}. \quad (4.16)$$

Определение значений ν и γ , а также скейлинговой функции $g(\mathbf{R}/\tilde{L}^\nu)$ в (4.14) требует в свою очередь определения величин X , Y и u , что удалось осуществить пока лишь в области $\varepsilon \ll 1$ в рамках ε -разложения. Полученный этим методом результат для 2ν с точностью до ε^2 совпадает с выражением (3.1), а для критического показателя γ отсюда следует: $\gamma \approx 2\nu$. Если в равенстве (3.1) формально положить $\varepsilon = 1$, то сумма первых трех членов ряда в (3.1) дает значение $2\nu \approx 1,184$, однако учет четвертого члена этого ряда приводит к значительно худшему результату $2\nu \approx 1,139$. Таким образом, метод ε -разложения, использованный в изложенных выше подходах к проблеме, не позволяет распространить полученные результаты за пределы малой окрестности размерности $d = 4$. Более подробно описание метода континуального интегрирования в проблеме СББС дано в монографии Фрида [36].

5. Основное уравнение

Ниже изложен подход, основанный на РГ-методе решения точного уравнения для плотности вероятности $W_N(\mathbf{R})$.

Пусть сферическая частица, диаметр которой равен r_0 , начинает блуждание из начала координат в \mathbf{R}^d так, чтобы каждое отдельное перемещение \mathbf{l}_i ее геометрического центра имело постоянную длину $|\mathbf{l}_i| = l$ ($i \geq 1$), но случайное направление. Кроме того, после каждого перемещения частица избегает те области пространства, которые она посещала после всех предшествующих перемещений. Отсюда тогда следует, что $r_0 < l$. С помощью метода Маркова [37] искомую плотность вероятности $W_N(\mathbf{R})$ распределения вектора \mathbf{R} , соединяющего концы траектории, состоящей из N отдельных перемещений частицы, представим в виде

$$W_N(\mathbf{R}) = Q_N^{-1} w_N(\mathbf{R}), \quad (5.1)$$

где

$$w_N(\mathbf{R}) = \int P_{1N} \delta \left(\mathbf{R} - \sum_{i=1}^N \mathbf{l}_i \right) \prod_{i=1}^N d\Omega_i; \quad (5.2)$$

$$P_{1N} = \prod_{1 \leq i < j \leq N} (1 + f_{ij}),$$

$$f_{ij} = f \left(\left| \sum_{k=i}^j \mathbf{l}_k \right| \right), \quad f(r) = \begin{cases} -1, & \text{если } r < r_0, \\ 0, & \text{если } r > r_0; \end{cases}$$

нормировочный множитель Q_N равен

$$Q_N = \int P_{1N} \prod_{i=1}^N d\Omega_i. \quad (5.3)$$

Далее, если определить функцию $a(z, \vec{\rho})$ посредством равенства

$$a(z, \vec{\rho}) = \sum_{N \geq 0} z^N \int e^{i\vec{\rho} \cdot \mathbf{R}} w_N(\mathbf{R}) d^d R, \quad (5.4)$$

то для нее имеет место следующее уравнение [38]:

$$a^{-1}(z, \vec{\rho}) = a_0^{-1}(z, \vec{\rho}) - b(z, \vec{\rho}), \quad (5.5)$$

в котором

$$a_0^{-1}(z, \vec{\rho}) = 1 - z\Lambda_s(\rho l), \quad (5.6)$$

$$\Lambda_s(x) = \Gamma(1 + s)(2/x)^s J_s(x), \quad (5.7)$$

$s = (d - 2)/2$, $J_s(x)$ — функция Бесселя, а величина $b(z, \vec{\rho})$ представляет собой бесконечный ряд, первые несколько членов которого имеют вид

$$\begin{aligned} b(z, \vec{\rho}) = & - \int v(\vec{\kappa}) a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}) d^d \kappa / (2\pi)^d + \\ & + \int v(\vec{\kappa}) v(\vec{\kappa}') a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}) a(\vec{\rho} - \vec{\kappa} - \vec{\kappa}') a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}') d^d \kappa d^d \kappa' / (2\pi)^{2d} - \\ & - \int v(\vec{\kappa}) v(\vec{\kappa}') v(\vec{\kappa}'') (a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}) a(\vec{\rho} - \vec{\kappa} - \vec{\kappa}') a(\vec{\rho} - \vec{\kappa} - \vec{\kappa}' - \vec{\kappa}'') \times \\ & \times (a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}' - \vec{\kappa}'') a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}'') + \dots + a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}') a(\vec{\rho} - \vec{\kappa} - \vec{\kappa}'') \times \\ & \times a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}') a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}' - \vec{\kappa}'') a(\vec{\rho} - \vec{\kappa}'')) d^d \kappa d^d \kappa' d^d \kappa'' / (2\pi)^{3d} + \dots, \end{aligned} \quad (5.8)$$

где

$$v(\vec{\kappa}) = - \int e^{i\vec{\kappa}\vec{r}} f(r) d^d r = v_0 \Lambda_{1+s}(r_0 \kappa), \quad (5.9)$$

а v_0 — величина "исключенного объема", равная

$$v_0 = (\pi r_0^2)^{1+s} / \Gamma(2 + s). \quad (5.10)$$

Для упрощения записи формулы (5.8) зависимость функции $a(\vec{\rho} - \vec{\kappa})$ от z не указана. Уравнение (5.5) замкнуто относительно искомой величины $a(z, \vec{\rho})$ и по своей форме аналогично известному уравнению Дайсона. В исследуемой проблеме уравнение (5.5) играет важную роль, в связи с чем оно названо основным уравнением. Ряд в (5.8) удобно изобразить графически. Для этого каждому члену этого ряда сопоставим диаграмму, состоящую из некоторого числа вершин и набора сплошных и волнистых линий, соединяющих эти вершины. Кроме того, каждая диаграмма содержит еще две сплошные внешние линии, одна из которых называется "входящей", а другая — "выходящей". Каждой линии приписывается определенный вектор — "импульс", причем в каждой вершине, где сходятся две сплошные и одна волнистая линии, должен выполняться "закон сохранения импульса". Наконец, каждой внутренней сплошной линии сопоставляется величина $a(z, \vec{\rho} - \vec{\kappa})$, а каждой волнистой линии сопоставляется $-v(\vec{\kappa}) / (2\pi)^d$; затем по векторам всех волнистых линий выполняется интегрирование. Согласно этим правилам ряд в (5.8) можно представить как на рис. 1.

Анализ структуры членов ряда в (5.8) позволяет утверждать, что здесь нет проблемы, связанной с расходимостью интегралов. В самом деле, если во всех интегралах перейти к конфигурационным переменным $\{\mathbf{r}\}$, то нетрудно увидеть, что интегрирование по \mathbf{r} ограничено снизу по модулю величиной $|\mathbf{r}| = r_0$, в чем, собственно, и проявляется эффект "исключенного объема", в то время как на верхнем пределе ($r \rightarrow \infty$) подынтегральные функции экс-

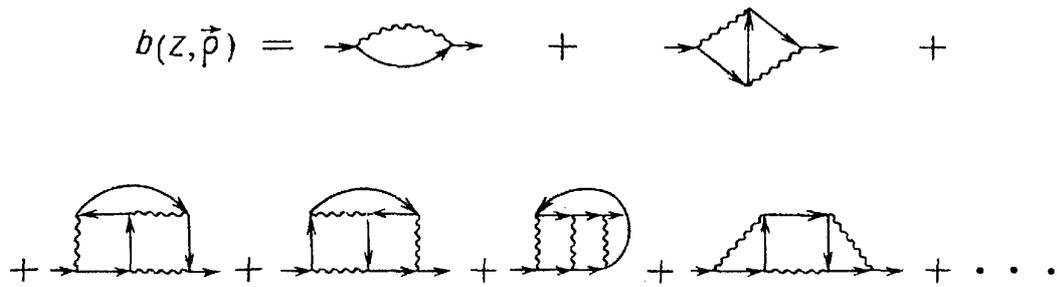


Рис. 1

пониженно стремятся к нулю из-за конечности числа перемещений, составляющих траекторию блуждающей частицы. Но остается еще проблема сходимости всего ряда в целом. Однако можно показать, что для всех вещественных значений ρ ряд в (5.8) абсолютно сходится по крайней мере в области $|z| < 1$.

Допустим, что нам известно решение уравнения (5.5). Тогда с помощью преобразования Фурье

$$w(z, \mathbf{R}) = \int e^{-i\mathbf{R}\vec{\rho}} a(z, \vec{\rho}) d^d \rho / (2\pi)^d \tag{5.11}$$

можно найти производящую функцию

$$w(z, \mathbf{R}) \equiv \sum_{N \geq 0} z^N w_N(\mathbf{R}), \tag{5.12}$$

а затем, используя формулу обращения

$$w_N(\mathbf{R}) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^{N+1}} w(z, \mathbf{R}), \tag{5.13}$$

определить функцию $w_N(\mathbf{R})$. Если еще учесть, что

$$Q_N = \int w_N(\mathbf{R}) d^d \mathbf{R}, \tag{5.14}$$

то согласно определению (5.1) мы получим искомую плотность вероятности $W_N(\mathbf{R})$. Теперь в равенстве (5.14) воспользуемся поочередно формулами (5.13) и (5.11), а затем выполним интегрирование по \mathbf{R} . В результате появится формула

$$Q_N = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^{N+1}} a(z, 0), \tag{5.15}$$

из которой следует, что

$$a(z, 0) = Q(z) \equiv \sum_{N \geq 0} z^N Q_N. \tag{5.16}$$

Объединяя последнее равенство с уравнением (5.5), получим

$$Q^{-1}(z) = 1 - z - b(z, 0). \tag{5.17}$$

Пусть z_0 обозначает ближайшую к началу координат особую точку функции $Q(z)$, т.е. по определению имеем

$$1 - z_0 - b(z_0, 0) \equiv 0. \tag{5.18}$$

Отсюда нетрудно видеть, что $z_0 = z_0(v_0/l^d)$, причем $z_0(0) = 1$. Таким образом, учет эффекта "исключенного объема" приводит к смещению особой точки z_0 из "невозмущенного" ее положения $z_0(0) = 1$. В теории аналитических функций утверждается, что граница круга сходимости степенного ряда проходит через ближайшую к началу координат его особую точку [39]. Кроме того, асимптотическое поведение функции, представленной степенным рядом, при приближении переменной z к границе круга его сходимости можно связать с асимптотическим поведением коэффициентов этого ряда, когда их порядковые номера стремятся к бесконечности [40]. Важность последнего утверждения обусловлена здесь тем, что первоочередной задачей для нас является определение асимптотики плотности вероятности $W_N(\mathbf{R})$ при $N \rightarrow \infty$ и $R \gg l$. В связи с этим целесообразно перейти от z к новой переменной $\zeta = z_0/z$ и ввести следующие обозначения:

$$A(\zeta, \rho) = \zeta^{-1}a(z, \rho),$$

$$B(\zeta, \rho l, v; A) = \zeta b(z, \rho),$$

$$v = \zeta^2 v_0 / l^d.$$

Тогда, учитывая тождество (5.18), уравнение (5.5) можно записать так

$$A^{-1} = \zeta - 1 + z_0(1 - \Lambda_s(\rho l)) + B(1, 0, v; A) - B(\zeta, \rho l, v; A). \quad (5.19)$$

Пусть теперь $\rho_1 \equiv i\xi$ ($\text{Re } \xi > 0$) обозначает ближайший к началу координат $\rho = 0$ корень уравнения $A^{-1}(\zeta, \rho) = 0$. Отсюда, полагая $\rho = \rho_1$ в уравнении (5.19), мы получим тождество

$$\zeta - 1 + z_0(1 - \Lambda_s(i\xi l)) + B(1, 0, v; A) - B(\zeta, i\xi l, v; A) \equiv 0, \quad (5.20)$$

связывающее между собой переменные ζ и ξ . Наконец, используя тождество (5.20) в (5.19), мы приходим к следующему виду основного уравнения:

$$A^{-1} = A_0^{-1}(\xi, \rho) + B(\zeta, i\xi l, v; A) - B(\zeta, \rho l, v; A), \quad (5.21)$$

где

$$A_0^{-1}(\xi, \rho) = z_0(\Lambda_s(i\xi l) - \Lambda_s(\rho l)). \quad (5.22)$$

Уравнение (5.21) совместно с тождеством (5.20) составляет основу излагаемого метода исследования проблемы СББС. Данный метод можно обобщить на тот случай, когда направление каждого отдельного перемещения частицы зависит от направления ее предыдущего перемещения и, кроме того, длина отдельного перемещения не фиксирована, а подчинена некоторому, вообще говоря, произвольному распределению [38].

Отметим здесь одно очень важное свойство уравнения (5.21), суть которого заключается в инвариантности этого уравнения относительно мультипликативных преобразований:

$$A \rightarrow A' = \alpha A, \quad A_0 \rightarrow A'_0 = \alpha A_0, \quad (5.23)$$

$$v \rightarrow v' = \alpha^{-2}v,$$

где α — не равный нулю непрерывно меняющийся параметр [41]. Нетрудно

видеть, что преобразования (5.23) образуют непрерывную группу, называемую обычно группой ренормировочных преобразований — ренормгруппой (РГ). Для выяснения физического смысла РГ в данном подходе запишем выражение для $W_N(\mathbf{R})$ в следующем виде

$$W_N(\mathbf{R}) = \oint_{\Gamma} d\xi \xi^N \tilde{w}(\xi, \mathbf{R}) / \oint_{\Gamma} d\xi \xi^N A(\xi, 0) \quad (5.24)$$

согласно формулам (5.1), (5.13) и (5.14), где

$$\tilde{w}(\xi, \mathbf{R}) = \int e^{-i\mathbf{R}\vec{\rho}} A(\xi, \rho) d^d \rho / (2\pi)^d, \quad (5.25)$$

а замкнутый контур интегрирования Γ выбран так, чтобы начало координат $\xi = 0$ и все особые точки подынтегральной функции находились внутри этого контура. Из формул (5.24) и (5.25) следует, что для определения асимптотики плотности $W_N(\mathbf{R})$, когда $N \rightarrow \infty$ и $R \gg l$, необходимо знать поведение функции $A(\xi, \rho)$ в малой окрестности точек $\xi = 1$ и $\rho = 0$. В дальнейшем всюду предполагается, что значения ξ и ρ принадлежат окрестностям указанных выше точек. Но тогда согласно равенствам

$$\Lambda_s(x) = 1 - x^2/2d + O(x^4), \quad x \sim 0, \quad (5.26)$$

и (5.20) значения ξ принадлежат окрестности точки $\xi = 0$. Далее с помощью формул (5.24), (5.25) и уравнения (5.19) нетрудно показать, что изменение числа перемещений N в α раз, т.е. $N \rightarrow N' = \alpha N$, эквивалентно изменению длины l одного перемещения согласно равенству $l' = l/\sqrt{\alpha}$ и величины "исключенного объема" v_0 по правилу $v' = \alpha^{s-1}v$. Необходимо, однако, подчеркнуть, что это утверждение относится лишь к асимптотическому случаю ($N \rightarrow \infty$, $R \gg l$) и в символической форме его можно представить так:

$$W_N(R/l, v_0/l^d) = W_{\alpha N}(\alpha^{1/2}R/l, \alpha^{s-1}v_0/l^d).$$

Отсюда вытекает следующее асимптотическое выражение для среднеквадратичного расстояния между концами траектории блуждающей частицы

$$\langle R^2 \rangle_N \sim N l^2 \chi(N^{1-s} v_0 / l^d),$$

где $\chi(x)$ — подлежащая определению универсальная функция. Из последней формулы видно, что размерность $d = 4$ ($s = 1$) является выделенной, поскольку эффект "исключенного объема" для $d > 4$ ($s > 1$) становится слабым и при вычислении величины $\langle R^2 \rangle_N$ можно использовать теорию возмущений. В работе [42] доказано, что для $d \geq 5$ асимптотика плотности $W_N(\mathbf{R})$ при $N \rightarrow \infty$ является гауссовым распределением.

5.1. Ренормгрупповые уравнения. Обратимся к уравнениям (5.20) и (5.21), первое из которых устанавливает связь между величинами ξ и ξ , а второе определяет тип особой точки $\rho_1 \equiv i\xi$ функции $A(\xi, \rho)$. Очевидно, что решение данной проблемы следует начать с определения характера сингулярности функции $A(\xi, \rho)$ в точке $\rho = \rho_1$. С этой целью искомую функцию $A(\xi, \rho)$ в (5.21) представим в виде

$$A = A_0 G. \quad (5.27)$$

Тогда для новой неизвестной величины G мы получим уравнение

$$G^{-1} = 1 + F(G), \quad (5.28)$$

в котором

$$F(G) = A_0(\xi, \rho)(B(\zeta, i\xi l, v; A_0 G) - B(\zeta, \rho l, v; A_0 G)), \quad (5.29)$$

а функция $A_0(\xi, \rho)$ в рассматриваемой области малых значений ξ и ρ ведет себя как

$$A_0(\xi, \rho) = 2d' z_0 (\xi^2 + \rho^2) l^2. \quad (5.30)$$

Если в (5.28) положить $\rho = 0$ и ввести обозначение: $G_0 = G|_{\rho=0}$, то с помощью полученного для G_0 уравнения равенство (5.20) можно привести к виду

$$E^{-1} = G_0^{-1} + A_0(\xi, 0)(B(\zeta, 0, v; A_0 G) - B(1, 0, v; A_0 G)), \quad (5.31)$$

где величина

$$E^{-1} = (\zeta - 1)A_0(\xi, 0) \quad (5.32)$$

для малых значений ξ пропорциональна отношению $(\zeta - 1)/\xi^2 l^2$. Как нетрудно видеть, уравнение (5.31) служит для непосредственного вычисления критического показателя ν , если, разумеется, определена функция G .

Поскольку величина G безразмерна, то ее можно рассматривать как функцию безразмерных переменных

$$G = G\left(\frac{\xi^2}{\lambda}, \frac{\rho^2}{\lambda}, \nu\right),$$

где значение параметра λ — точки нормировки мы выберем так, чтобы при $\rho^2 = \lambda$ выполнялось условие нормировки

$$G\left(\frac{\xi^2}{\lambda}, 1, \nu\right) = 1.$$

Тогда РГ — свойство уравнения (5.28), эквивалентного основному уравнению (5.21), удобно представить так

$$\alpha G\left(\frac{\xi^2}{\lambda}, \frac{\rho^2}{\lambda}, \nu\right) = G\left(\frac{\xi^2}{\lambda'}, \frac{\rho^2}{\lambda'}, \nu'\right), \quad (5.33)$$

где λ' — новая точка нормировки, для которой теперь

$$G\left(\frac{\xi^2}{\lambda'}, 1, \nu'\right) = 1, \quad (5.34)$$

а $\nu' = \alpha^{-2}\nu$. Уравнение (5.33) означает, что умножение величины G на отличное от нуля число α эквивалентно изменению точки нормировки и перенормировке "исключенного объема". Полагая $\rho^2 = \lambda'$ в (5.33) и учитывая условие (5.34), получим

$$\alpha^{-1} = G\left(\frac{\xi^2}{\lambda}, \frac{\lambda'}{\lambda}, v\right),$$

и в новых обозначениях

$$x = \xi^2/\lambda, \quad y = \rho^2/\lambda, \quad t = \lambda'/\lambda$$

равенство (5.33) примет вид

$$G(x, y, v) = G(x, t, v)G(x/t, y/t, vG^2(x, t, v)). \quad (5.35)$$

Если теперь обе части последнего равенства возвести в квадрат, а затем умножить на v , то в итоге мы получим для инвариантной относительно РГ-преобразований величины

$$V(x, y, v) = vG^2(x, y, v) \quad (5.36)$$

функциональное уравнение

$$V(x, y, v) = V(x/t, y/t, V(x, t, v)) \quad (5.37)$$

со следующим условием нормировки

$$V(x, 1, v) = v. \quad (5.38)$$

Поскольку РГ — непрерывная группа, то она может быть описана соответствующими дифференциальными уравнениями Ли, чрезвычайно полезными для практических целей. Чтобы получить уравнение Ли, например, для $V(x, y, v)$, продифференцируем обе части равенства (5.37) по y и затем положим $t = y$. В результате имеем

$$y \frac{\partial V(x, y, v)}{\partial y} = \beta\left(\frac{x}{y}, V(x, y, v)\right), \quad (5.39)$$

где

$$\beta(x, v) = \frac{\partial V(x, y, v)}{\partial y} \Big|_{y=1}, \quad (5.40)$$

а граничным условием уравнения (5.39) служит условие нормировки (5.38). Если же равенство (5.37) продифференцировать по t и затем положить $t = 1$, то мы получим другую форму уравнения Ли:

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} - \beta(x, v) \frac{\partial}{\partial v}\right) V(x, y, v) = 0.$$

Приведенные выше РГ-уравнения оказываются особенно полезными при исследовании асимптотических свойств функции $G(x, y, v)$. Поэтому, чтобы найти асимптотику величины $G(x, y, v)$, когда, например, $x \rightarrow 0$, $y \rightarrow 0$, но при этом $|x/y| \ll 1$, в уравнении (5.39) перейдем к пределу при $x \rightarrow 0$. Тогда, обозначая

$$V(y, v) = \lim_{x \rightarrow 0} V(x, y, v), \quad \beta(v) = \frac{\partial V(y, v)}{\partial y} \Big|_{y=1}, \quad (5.41)$$

мы приходим к следующему уравнению

$$y \frac{\partial V(y, v)}{\partial y} = \beta(V(y, v)) \quad (5.42)$$

с граничным условием

$$V(1, v) = v. \quad (5.43)$$

Уравнение (5.42) совместно с равенством (5.43) можно записать также в форме уравнения Гелл-Манна—Лоу:

$$\int_v^{V(y,v)} \beta^{-1}(t) dt = \ln y. \quad (5.44)$$

Таким образом, согласно полученным РГ-уравнениям, эффективным параметром, характеризующим интенсивность объемного взаимодействия, в малой окрестности точек $\xi = 0$ и $\rho = 0$ является инвариантный "исключенный объем". Поэтому, чтобы определить асимптотическое поведение, например, функции $G(y, v)$ при $y \rightarrow 0$, необходимо знать, как при этом ведет себя величина $V(y, v)$. Но поведение последней определяется свойствами функции $\beta(v)$. Поскольку для вычисления функции $\beta(v)$ обычно используется теория возмущений, то реально можно судить о ее поведении лишь в малой окрестности точки $v = 0$, в которой $\beta(0) = 0$. В самом деле, если в этой окрестности величина $\beta(v)$ положительна, то согласно уравнению (5.42) инвариантный "исключенный объем" $V(y, v)$ стремится к нулю, когда $y \rightarrow 0$. Если же функция $\beta(v)$ отрицательна вблизи нуля, то при $y \rightarrow 0$ величина $V(y, v)$ возрастает, в результате чего мы выходим за рамки применимости теории возмущений.

Как уже отмечалось выше, для определения асимптотики плотности вероятности $W_N(\mathbf{R})$, когда $N \rightarrow \infty$ и $R \gg l$, необходимо знать поведение функции $A(\xi, \rho)$ в малой окрестности точек $\xi = 1$ и $\rho = 0$ или, что то же, функции $G(x, y, v)$ вблизи $x = 0$ и $y = 0$. В этом случае наиболее существенными областями интегрирования в членах ряда (5.8), очевидно, будут те области, в которых значения аргументов у всех подинтегральных функций по модулю малы, т.е. когда для каждой переменной интегрирования κ справедливо условие $\kappa l \ll 1$. Для таких значений κ выполняется также неравенство $\kappa r_0 \ll 1$, так как $r_0 < 1$. Тогда согласно (5.9) и (5.26) для достаточно малых значений κ мы получим приближенно равенство $v(\kappa) = v_0$, которому соответствует известное в теории полимеров приближение $f(r) = -v_0 \delta(r)$.

С другой стороны, когда величина κ возрастает и принимает значения $\kappa \geq l^{-1}$ (а сопряженная ей величина R , соответственно, убывает до значений $R \leq l$), объем пространственной области, доступной для блуждающей частицы, уменьшается благодаря возрастанию эффекта "исключенного объема". В связи с этим плотность вероятности $W_N(\mathbf{R})$ в области $R \leq l$ и, соответственно, функция $A(\xi, \kappa)$ для $\kappa \geq l^{-1}$ должны принимать предельно малые значения. Поэтому область интегрирования $\kappa \geq l^{-1}$ во всех членах ряда (5.8) вносит несущественный вклад и мы вправе использовать приближение $v(\kappa) = v_0$ в (5.8) для всех κ . Тогда ряд (5.8) можно записать так:

$$B(\xi, \rho l, v_0; A) = -v_0 \int A(\xi, \kappa) d^d \kappa / (2\pi)^d + \\ + v_0^2 \int A(\xi, \vec{\rho} - \vec{\kappa}) M(\xi, \kappa) d^d \kappa / (2\pi)^d -$$

$$- 2v_0^3 \int A(\xi, \vec{\rho} - \vec{\kappa}) M^2(\xi, \kappa) d^d \kappa / (2\pi)^d + \dots, \tag{5.45}$$

где $v_0 = \xi^2 v_0$,

$$\int A(\xi, \kappa) d^d \kappa / (2\pi)^d = \tilde{w}(\xi, 0), \tag{5.46}$$

$$\begin{aligned} M(\xi, \kappa) &= \int A(\xi, \kappa - \kappa') A(\xi, \kappa') d^d \kappa' / (2\pi)^d = \\ &= \omega \int_0^\infty \Lambda_s(\kappa R) \tilde{w}^2(\xi, R) R^{2s+1} dR \end{aligned} \tag{5.47}$$

в соответствии с формулой (5.25). В результате принятого приближения некоторые члены ряда в (5.8) описываются теперь одинаковым образом. Поэтому соответствующее таким членам выражение в (5.45) надо умножить на определенный коэффициент, характеризующий их степень симметрии, что и было сделано в третьем слагаемом ряда в (5.45). Диаграммное изображение членов ряда (5.45) можно получить из соответствующего диаграммного представления ряда (5.8) на рис. 1 в результате стягивания волнистой линии в точку так, чтобы последней соответствовал множитель $-v_0 / (2\pi)^d$ и в каждой такой точке по-прежнему выполнялся "закон сохранения импульса". В итоге мы приходим к представлению ряда, как на рис. 2, где квадрат в диаграмме (2) обозначает совокупность диаграмм рис. 3, называемую обычно вершинной частью. При этом очень важно, что для вершинной части можно установить замкнутое уравнение [9], которое вместе с основным уравнением образует

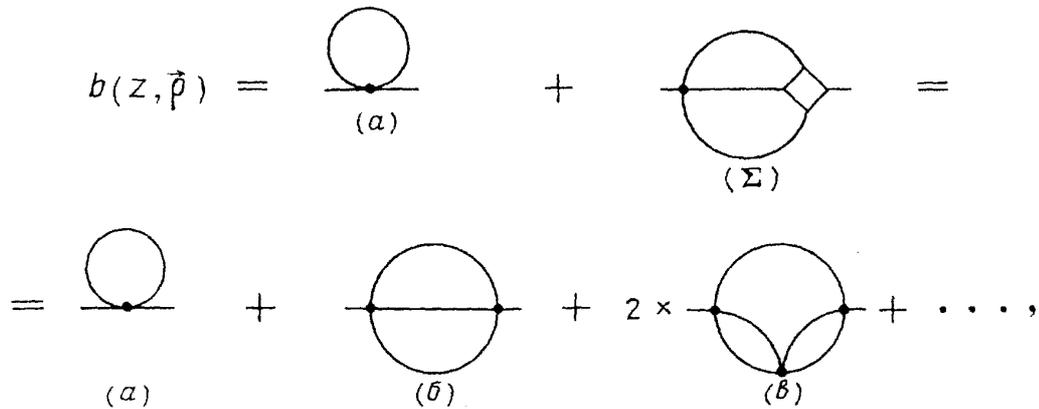


Рис. 2

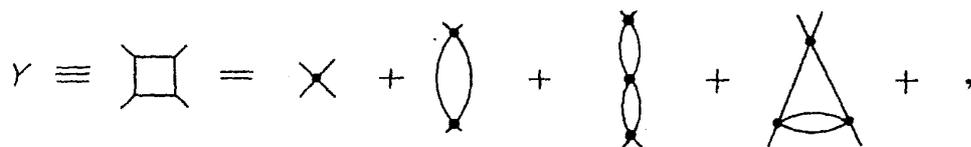


Рис. 3

замкнутую систему.

В заключение отметим, что, следуя описанной выше схеме вывода РГ-уравнений и меняя ролями величины ξ^2 и ρ^2 , т.е. считая теперь переменную ξ^2 лидирующей, мы получим в итоге аналогичные по форме РГ-уравнения.

5.2. Самоизбегающие блуждания в пространстве с размерностью $d \leq 4$. Приступим, наконец, к определению плотности вероятности $W_N(\mathbf{R})$. Для этого необходимо, прежде всего, найти явный вид функции $B(\zeta, \rho l, v_0; A)$ согласно ее определению в (5.45). Однако при вычислении этой функции мы вынуждены использовать для неизвестной величины A какое-то приближение, вид которого будет приведен ниже. Напомним теперь, что формула (5.45) была получена при условии $v(\kappa) = v_0$ для всех значений κ . В результате этого было устранено ограничение сверху на область интегрирования по переменной κ . Поэтому во избежание возможной расходимости в области больших значений κ естественно ввести некоторый параметр обрезания. В связи с этим при выборе исходного приближения для A удобно использовать функцию Макдональда $K_\mu(t)$ благодаря подходящим для наших целей ее свойствам

$$\begin{aligned} K_\mu(t) &\sim 2^{\mu-1} \Gamma(\mu) t^{-\mu}, \quad \mu > 0, \quad t \ll 1, \\ &\sim (\pi/2t)^{1/2} e^{-t}, \quad t \gg 1. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Так, например, в роли "невозмущенной" функции для A вместо $A_0(\xi, \kappa)$ может выступать также функция

$$A_1(\xi, \kappa) = \frac{2dL}{z_0 l^2 (\xi^2 + \kappa^2)^{1/2}} K_1(L(\xi^2 + \kappa^2)^{1/2}), \quad (5.49)$$

где $\xi \sim 0$, а $L \geq l$. Действительно, при малых значениях κ величина $A_1(\xi, \kappa)$ ведет себя как $A_0(\xi, \kappa)$, а для больших значений κ ($\kappa \gg L^{-1}$) функция $A_1(\xi, \kappa)$ экспоненциально стремится к нулю.

В дальнейшем ради упрощения записи формул будем обозначать посредством C положительные константы, зависящие, возможно, лишь от размерности пространства, т.е. в разных формулах величина C может принимать, вообще говоря, различные значения, которые, однако, при необходимости могут быть записаны в явной форме.

5.2.1. Случай $d = 4$ ($s = 1$). В качестве исходного приближения для искомой величины A выберем функцию

$$A_1(\xi, \kappa) = \frac{8L}{z_0 l^2 (\xi^2 + \kappa^2)^{1/2}} K_1(L(\xi^2 + \kappa^2)^{1/2}). \quad (5.50)$$

Это означает, что соответствующее исходное приближение для G , согласно равенству (5.27), можно считать равным единице. Тогда, подставляя выражение (5.50) в формулу (5.25) вместо функции $A(\zeta, \kappa)$, получим

$$w_1(\xi, R) = \frac{2\xi}{\pi^2 z_0 l^2 (R^2 + L^2)^{1/2}} K_1(\xi(R^2 + L^2)^{1/2}). \quad (5.51)$$

Если теперь в равенствах (5.45) — (5.47) вместо величин $A(\zeta, \kappa)$ и $\tilde{w}(\zeta, R)$

воспользоваться их приближениями (5.50) и (5.51), а затем положить $\xi = 1$ ($\xi = 0$), то в результате имеем

$$G^{-1}(0, y, v) = 1 - \frac{1}{2}v_1^2 \ln y - 2v_1^3(\ln^2 y - C \ln y) + \dots, \quad (5.52)$$

где $v_1 = 4v_0/\pi^2 z_0^2 l^4$. Используя затем выражение (5.52) для определения функции $\beta(v)$ из формул (5.41), находим

$$\beta(v) \sim v^3, \quad v \sim 0.$$

Наконец, учитывая полученный для $\beta(v)$ результат в уравнении (5.44), мы придем после его решения к следующему выражению инвариантного "исключенного объема"

$$V(y, v) = v(1 - 2v^2 \ln y)^{-1/2},$$

откуда уже нетрудно найти функцию $A(1, \rho)$:

$$A^{-1}(1, \rho) = (4\pi)^{-1} \rho^2 (4v_0^2 \ln \rho^{-1})^{1/4}. \quad (5.53)$$

Далее в рассматриваемом здесь случае уравнение (5.19) при $\xi \sim 1$ можно заменить приближенным равенством

$$A^{-1}(\xi, \rho) = \xi - 1 + A^{-1}(1, \rho). \quad (5.54)$$

Если в правой части соотношения (5.54) учесть выражение (5.53), а затем полученный результат для $A(\xi, \rho)$ подставить в формулу (5.25), то при достаточно больших значениях R ($R \gg l$) нетрудно определить вид функции $\tilde{w}(\xi, R)$. Подставим теперь найденное выражение для $\tilde{w}(\xi, R)$ в формулу обращения (5.24) и воспользуемся методом перевала при асимптотической оценке интеграла, когда $N \rightarrow \infty$. В итоге мы получим для главного члена асимптотического разложения плотности вероятности $W_N(\mathbf{R})$ следующий результат [43]:

$$W_N(\mathbf{R}) \sim (\pi N_1)^{-2} \left(\ln \frac{N_1}{R} \right)^{-1/2} \exp \left[- \frac{R^2}{N_1 [\ln(N_1/R)]^{1/4}} \right], \quad (5.55)$$

где $N_1 = (2v_0/\pi^2)^{1/2} N$. Отсюда нетрудно найти соответствующую асимптотику для среднеквадратичного расстояния $\langle R^2 \rangle_N$ между концами траектории блуждающей частицы

$$\langle R^2 \rangle_N \sim N_1 (8 \ln N_1)^{1/4}.$$

Последний результат хорошо согласуется с численными расчетами величины $\langle R^2 \rangle_N$, когда $d = 4$ [44].

5.2.2. Случай $d < 4$ ($s < 1$). Вначале мы кратко изложим традиционный подход к проблеме. В этом случае исходным приближением для функции $A(\xi, \rho)$ в формулах (5.45) — (5.47) может служить выражение (5.49). Если теперь во всех формулах перейти к пределу при $\xi \rightarrow 1$ ($\xi \rightarrow 0$), то после интегрирования в (5.45) мы получим для величины $G|_{\xi=0}$ следующий результат:

$$G^{-1}|_{\xi=0} = 1 + \frac{1}{2\varepsilon} v_1^2 (\rho l)^{-2\varepsilon} - \frac{8}{3\varepsilon^2} v_1^3 (\rho l)^{-3\varepsilon} + \dots, \quad (5.56)$$

где $v_1 = v_0 d / \pi^2 z_0^2 l^d$. Отсюда нетрудно найти функцию $\beta(v)$ согласно ее определению в (5.41). В рассматриваемом приближении она равна

$$\beta(v) = v^3 \left(1 - \frac{8}{\varepsilon} v\right). \quad (5.57)$$

В тех случаях, когда функция $\beta(v)$ может принимать отрицательные значения, удобно использовать следующую форму уравнения Гелл-Манна—Лоу:

$$\int_{V(y,v)}^v |\beta(t)|^{-1} dt = \ln y. \quad (5.58)$$

Из равенства (5.57) следует, что функция $\beta(v)$ линейно обращается в нуль в точке

$$v = v_* \equiv \frac{\varepsilon}{8},$$

вследствие чего значение интеграла по модулю в уравнении (5.58) неограниченно возрастает, когда величина $V(y, v)$ стремится к v_* . Таким образом, значение v_* является пределом инвариантного "исключенного объема" V :

$$V(0, v) = v_*.$$

Для анализа поведения функции $V(y, v)$ при $y \rightarrow 0$ в уравнении (5.58) воспользуемся приближением

$$\beta(v) \approx \frac{\varepsilon^2}{64} (v_* - v).$$

В результате получим

$$V(y, v) \approx v_* + C(v - v_*) y^{\varepsilon^2/64}. \quad (5.59)$$

Отсюда следует, что критический показатель η , характеризующий асимптотическую зависимость $G \sim (\rho l)^\eta$ (или $A \sim (\rho l)^{\eta-2}$) при $\rho \sim 0$ равен $\eta = \varepsilon^2/64$ и, стало быть, очень мал по сравнению с единицей.

Перейдем теперь к вычислению другого критического показателя ν , определяющего асимптотическую зависимость $\xi l \sim (\zeta - 1)^\nu$, когда $\zeta \sim 1$. Для этого обратимся к уравнению (5.31) и вычислим его правую часть с точностью до членов второго порядка по v_1 . В итоге имеем

$$E^{-1} = 1 + \frac{2}{\varepsilon} v_1 (\xi l)^{-\varepsilon} - \frac{6}{\varepsilon^2} v_1^2 (\xi l)^{-2\varepsilon} + \dots \quad (5.60)$$

В роли инвариантного "исключенного объема" здесь выступает величина

$$\bar{v}(x, v) = v E^{-\varepsilon/2},$$

где $x = C(\zeta - 1)$. Если обе части равенства (5.60) возвести в степень, равную $\varepsilon/2$, а затем умножить на v_1 , то в результате мы получим уравнение

$$\bar{v}(x, v) = v \left(1 + x^{-\varepsilon/2} \bar{v}(x, v) - \frac{4}{\varepsilon} x^{-\varepsilon} \bar{v}^2(x, v) + \dots\right).$$

Отсюда согласно определению

$$\beta(v) = \left. \frac{\partial \bar{v}(x, v)}{\partial x} \right|_{x=1}$$

находим функцию

$$\beta(v) = \frac{4v^2(v - v_*)}{1 + v(v - v_*)/v_*},$$

которая вблизи точки $v = v_*$ ведет себя как

$$\beta(v) \approx \frac{\varepsilon^2}{16}(v - v_*).$$

Используя последнее приближение в уравнении Гелл-Манна—Лоу, находим

$$\bar{v}(x, v) \approx v_* + C(v - v_*)x^{-\varepsilon^2/16},$$

отсюда следует, что $E \sim x^{\varepsilon/8}$ (или $(\xi l)^2 \sim (\xi - 1)^{1+\varepsilon/8}$), когда $\xi \sim 1$. Таким образом, для критического показателя ν мы получаем известный результат $2\nu \approx 1 + (\varepsilon/8)$.

Ранее было отмечено, что основанные на ε -разложении различные подходы к проблеме СББС приводят к результатам, использование которых в реальном пространстве, вообще говоря, незаконно. Это обстоятельство, возможно, обусловлено тем, что "затравочное" приближение для искомой величины $A(\xi, \rho)$ обычно представлено "невозмущенной" функцией $A_0(\xi, \rho)$. Вместе с тем отличие от нуля критического показателя η свидетельствует о том, что особые точки функции $A(\xi, \rho)$ могут иметь неполюсный характер. Поэтому, чтобы расширить область применения полученных результатов, целесообразно с самого начала выбрать для $A(\xi, \rho)$ такое приближение, которое содержало бы неполюсные особенности. Ниже мы изложим метод, позволяющий определять критические показатели в области $d < 4$.

Обратимся к уравнению (5.21) и отметим, что в случае $\xi \sim 0$ и $\rho \sim 0$ переменные ξ и ρ фигурируют в (5.21) лишь в виде $\xi^2 + \rho^2$ согласно равенству (5.30). Поскольку функция $A(\xi, \rho)$ — четная относительно ρ , а ближайшие к началу $\rho = 0$ ее особые точки равны $\rho_{1,2} = \pm i\xi$, то естественно принять в качестве исходного приближения для G следующее выражение:

$$\tilde{G}(\xi, \rho) \sim u^{2\mu}(\xi^2 + \rho^2)^\mu, \quad (5.61)$$

в котором $\rho \ll L^{-1}$, а параметры $u = u(v_0)$, $\mu = \mu(d)$ ($0 < \mu < 1$) и $L \geq l$ подлежат еще определению. В том случае, когда $\rho \gg L^{-1}$, величину $\tilde{G}(\xi, \rho)$ будем считать пренебрежимо малой. Соответственно принятому приближению для G и равенству (5.27) рассмотрим функцию

$$\tilde{A}(\xi, \rho) = Cz_0^{-1}u^{2\mu} \left(\frac{L^2}{\xi^2 + \rho^2} \right)^{(1-\mu)/2} K_{1-\mu} \left(L(\xi^2 + \rho^2)^{1/2} \right) \quad (5.62)$$

в качестве исходного приближения для $A(\xi, \rho)$. Следует подчеркнуть, что выбор явного вида этого приближения неоднозначен, однако в любом случае его поведение при $\rho \ll L^{-1}$ и $\rho \gg L^{-1}$ должно удовлетворять указанным выше

условиям. Действительно, так как $\xi \sim 1$ ($\xi \sim 0$), то величина $\tilde{A}(\xi, \rho)$ согласно ее определению в (5.62) ведет себя при $\rho L \ll 1$ как

$$O(u^{2\mu}(\xi^2 + \rho^2)^{\mu-1})$$

и экспоненциально стремится к нулю, когда $\rho L \gg 1$. Таким образом, задача теперь сводится к вычислению значений параметров u , μ и L , при которых пробная функция $\tilde{A}(\xi, \rho)$ представляет собой в определенном смысле решение уравнения (5.21).

Допустим, что значения u , μ и L определены. Тогда, подставив функцию (5.62) в формулу (5.25) вместо $A(\xi, \rho)$ получим выражение

$$\tilde{w}(\xi, R) = Cz_0^{-1} u^{2\mu} \left(\frac{\xi^2}{R^2 + L^2} \right)^{(\mu+s)/2} K_{\mu+s}(\xi(R^2 + L^2)^{1/2}), \quad (5.63)$$

которым мы затем воспользуемся в формуле обращения

$$\tilde{w}_N(R) = \frac{i}{2\pi z_0^N} \oint d\xi e^{N \ln \xi} \tilde{w}(\xi, R). \quad (5.64)$$

Для асимптотической оценки интеграла в (5.64), когда значения N и R стремятся к бесконечности, но их отношение R/N фиксировано и $(R/N) \ll 1$, перейдем к новой переменной интегрирования ξ с помощью тождества (5.20). Если теперь в выражении (5.63) учесть асимптотические свойства функции $K_{\mu+s}(t)$ при $t \rightarrow \infty$ и ввести обозначение

$$D(\xi, t) = B(\xi, i\xi l, v_0; A) - B(1, 0, v_0; A) - t\xi + O(\xi^2),$$

то формулу (5.64) можно привести к виду

$$\begin{aligned} \tilde{w}_N(R) &\sim (Cu^{2\mu}/z_0^{N+1} R^{\mu+s+1/2}) \times \\ &\times \int d\xi (d\xi/d\xi) \xi^{\mu+s-1/2} \exp(ND(\xi, R/N)). \end{aligned} \quad (5.65)$$

Наконец, используя метод перевала для асимптотической оценки интеграла в (5.65), когда $N \rightarrow \infty$, мы получим искомую асимптотику функции $\tilde{w}_N(R)$.

Для определения величин u , μ и L воспользуемся их независимостью от переменных ξ и ρ . В связи с этим в уравнении (5.28) положим $\xi = 0$ и ради упрощения записи формул зависимость величин от значения $\xi = 0$ указывать не будем. В этом случае функция $\tilde{G}(\rho) = \tilde{A}(\rho)/A_0(\rho)$ вблизи точки $\rho = 0$ ведет себя как

$$\tilde{G}(\rho) \sim (u^2 \rho^2)^\mu, \quad (5.66)$$

и ее можно принять в качестве асимптотического решения уравнения (5.28) при $\xi = 0$ и $\rho \sim 0$, если бы

$$\begin{aligned} F(\tilde{G}) &= A_0(\rho)(B(1, 0, v_0; \tilde{A}) - B(1, \rho l, v_0; \tilde{A})) \sim \\ &\sim \sum_{m \geq 1} (-\mu \ln u^2 \rho^2)^m / m!. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Однако, согласно РГ-методу, для определения асимптотики функции $G(\rho)$, когда $\rho \sim 0$, необходимо знать коэффициент лишь при линейном логариф-

мическом члене в разложении величины $F(\tilde{G})$:

$$F(\tilde{G}) = (2d/z_0 \rho^2 l^2) [\omega v_0^2 \int_0^\infty dR R^{2s+1} (1 - \Lambda_s(\rho R)) \tilde{w}^3(R) - \\ - 2\omega v_0^3 \int_0^\infty dR R^{2s+1} (1 - \Lambda_s(\rho R)) \tilde{w}(R) \int \tilde{w}^2(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \tilde{w}^2(r) d^d r + \dots]. \quad (5.68)$$

по степеням $\ln \rho^2 L^2$. Первый член ряда в (5.68), определяющий вклад в величину $F(\tilde{G})$ от диаграммы (б) на рис. 2, запишем в виде

$$F_6(\rho) = A_0(\rho)(B_6(0) - B_6(\rho)), \quad (5.69)$$

где

$$B_6(\rho) = \omega v_0^2 \int_0^\infty \Lambda_s(\rho R) \tilde{w}^3(R) R^{2s+1} dR = \\ = C v_0^2 z_0^{-3} u^{6\mu} (\rho/L)^{3\mu+2s-1} K_{3\mu+2s-1}(\rho L) \quad (5.70)$$

обозначает вклад этой диаграммы в $B(1, \rho l, v_0; \tilde{A})$. Если теперь подставить выражение (5.70) в правую часть равенства (5.69) и принять во внимание формулу

$$tK_1(t) = 1 + (t^2/2)\ln t + O(t^2), \quad t \sim 0,$$

то нетрудно видеть, что логарифмическое поведение функции $F_6(\rho)$ при $\rho \sim 0$ можно обеспечить, положив $3\mu + 2s - 2 = 0$, т.е.

$$\mu = (4 - d)/3. \quad (5.71)$$

В самом деле, из равенств (5.69) — (5.71) следует, что

$$F_6(\rho) \sim -C(v_0/z_0^2)^2 u^{6\mu} \ln \rho^2 L^2. \quad (5.72)$$

Сравнение выражения (5.72) с первым членом ряда в (5.67) приводит к идее определить величины u и L так, чтобы

$$(v_0/z_0^2)^2 u^{6\mu} = C\mu, \quad L = Cu, \quad (5.73)$$

и тем самым

$$F_6(\rho) \sim -C\mu \ln u^2 \rho^2. \quad (5.74)$$

Перейдем теперь ко второму члену ряда в (5.68), определяющему вклад в величину $F(\tilde{G})$ от диаграммы (в) на рис. 2. Отличие последней от диаграммы (б) вызвано добавлением одной вершины и двух линий, образующих петлевую поддиаграмму. В результате добавления такой "петли" в рассматриваемом члене ряда в (5.68) под знаком интеграла появится дополнительный множитель

$$-C\mu^{1/2} (\kappa L)^{\mu/2} K_{\mu/2}(\kappa L), \quad (5.75)$$

который для достаточно малых значений переменной κ почти не зависит от нее и оказывается пренебрежимо малым, когда $\kappa \gg L^{-1}$. Выражение (5.75)

может служить также для оценки вклада в величину $F(\tilde{G})$ при переходе от произвольно выбранной диаграммы к следующей по числу вершин диаграмме, так как любой такой переход всегда сопровождается добавлением одной вершины и двух линий.

Обратимся к диаграммному ряду на рис. 3, изображающему совокупность всех возможных диаграмм с четырьмя внешними линиями. Такая совокупность четырехугольных диаграмм, называемая иногда полным четырехполюсником, составляет вершинную часть Y в диаграмме (Σ) на рис. 2. Как уже отмечалось, для полного четырехполюсника можно установить замкнутое уравнение, которое в случае $\mu \ll 1$ удается решить в так называемом паркетном приближении. Полученное таким путем решение для Y можно теперь использовать для оценки величины $F(\tilde{G})$. В конечном итоге мы приходим к представлению $F(\tilde{G})$ в виде ряда по степеням $-\mu \ln \rho^2 L^2$.

Далее при подходящем выборе констант в равенствах (5.73) можно достичь совпадения линейных относительно $\ln u^2 \rho^2$ членов в выражениях (5.67) и (5.68). Используя затем полученное разложение для $F(\tilde{G})$ в РГ-уравнении, мы находим, что $G(\rho) \sim (u^2 \rho^2)^\mu$, т.е. $G(\rho) \equiv \tilde{G}(\rho)$, когда $\rho \sim 0$. Именно этот результат и оправдывает выбор функции $\tilde{G} = A/A_0$ в качестве асимптотического решения уравнения (5.28).

Поскольку значения параметров u , μ и L определены и тем самым определены функции в (5.62) и (5.63), то отсюда можно найти теперь и функцию $D(\xi, R/N)$ в формуле (5.65). В итоге имеем

$$D(\xi, R/N) = C v_1^{1/3} \xi^{1/\nu_F} - \xi R/N + O(\xi^2), \quad (5.76)$$

где

$$v_1 = z_0 v_0 / (1 - s)^2, \quad (5.77)$$

$$\nu_F = 3/(d + 2). \quad (5.78)$$

Поскольку подынтегральная функция в (5.65) определена, то, применяя метод перевала для асимптотической оценки интеграла в формуле (5.65), когда $N \rightarrow \infty$, а $R \gg l$, мы получим искомую асимптотику плотности вероятности [45]:

$$\begin{aligned} W_N(R) &\sim R_F^{-1} \delta(t - 1), \quad d = 1, \\ &\sim C R_F^{-d} t^p \exp(-t^q), \quad 1 < d < 4, \end{aligned} \quad (5.79)$$

где

$$\begin{aligned} t &= R/R_F, \quad R_F = C \left(v_1^{1/3} N \right)^{\nu_F}, \\ p &= \frac{(4 - d)(d + 2)}{6(d - 1)}, \quad q = \frac{d + 2}{d - 1}. \end{aligned} \quad (5.80)$$

Отсюда для среднеквадратичного расстояния между концами траектории блуждающей частицы вытекает следующий результат:

$$\langle R^2 \rangle_N \sim C R_F^2,$$

который представляет собой известное обобщение формулы Флори на d -мерный случай ($d < 4$). В том случае, когда значение $\epsilon = 4 - d$ достаточно мало, критический показатель ν_F согласно (5.78) равен

$$\nu_F = \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{12} + O(\varepsilon^2)$$

и, стало быть, в первом порядке по ε совпадает с соответствующим результатом Вильсона, полученным для стандартной модели скалярной теории поля. Таким образом, изложенный метод принципиально отличается от теории де Жена и приводит к новому ε -разложению в окрестности критической размерности $d = 4$, причем это ε -разложение является уже сходящимся.

Далее, согласно формуле (5.79), асимптотика функции $W_N(R)$ в области $R < R_F$ имеет "провал", обусловленный эффектом "исключенного объема", при этом для $d = 2$ она выпукла вниз ($p = 4/3$) и выпукла вверх ($p = 5/12$), когда $d = 3$. Для описания поведения плотности $W_N(R)$ в области $R < R_F$ обычно вместо p используют другой критический показатель γ , с помощью которого вычисляется вероятность возврата блуждающей частицы в исходную точку. При этом зависимость между γ и p определяется формулой Клуазо: $\gamma = 1 + pv$ [46]. Если в последнее равенство подставить вместо v выражение для ν_F из (5.78) и воспользоваться значением p из (5.80), то получим $\gamma = 2$ для $d = 2$ и $\gamma = 5/4$, когда $d = 3$. Для сравнения отметим, что значения γ , вычисленные в ряде работ (см., например, [47 — 51]) с помощью как аналитических методов, так и вычислительных машин, оказываются несколько меньше приведенных выше значений γ . Однако здесь следует учесть, что формула (5.79) является асимптотической и получена при условии $R \gg l$.

В соответствии с принятыми в теории критических явлений обозначениями можно написать $A(1, \rho) \sim O(\rho^{\eta-2})$, когда $\rho \sim 0$, и $A(\xi, 0) \sim O((\xi - 1)^{-\gamma})$, когда $\xi \sim 1$. Тогда, принимая выражение (5.62) в качестве асимптотического решения основного уравнения, когда $\xi \sim 1$ и $\rho \sim 0$, получим, что $\eta = 2\mu$, а критические показатели γ , η и ν_F связаны между собой известным соотношением: $\gamma = (2 - \eta)\nu_F$. Что же касается другого критического показателя q , то формула, приведенная для него в (5.80), является общепринятой.

6. Заключение

Итак, мы изложили здесь в общих чертах различные схемы исследования проблемы СББС. Уникальность этой проблемы среди известных физических задач обусловлена наличием "памяти" в рассматриваемой системе, что и отражено в интегральной форме основного уравнения. Важнейшее свойство этого уравнения — инвариантность его относительно непрерывной группы масштабных преобразований дало возможность использовать ренормгрупповой метод для вычисления асимптотики плотности вероятности $W_N(R)$. Несмотря на то что асимптотический характер полученных результатов в известной степени затрудняет сравнение их с опытными данными, согласие теоретических и экспериментальных результатов, установленных, например, для критических показателей, можно считать вполне хорошим.

Автор искренне признателен М.Ф. Головки, В.И. Кляцкину, М.П. Козловскому, В.Б. Приезжеву, С.М. Рытову, В.И. Татарскому, М.Д. Франк-Каменецкому, С.Я. Френкелю, А.Р. Хохлову, Д.В. Ширкову и И.Р. Юхновскому за интерес к данной проблеме и ее обсуждение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Flory P.J.//J. Chem. Phys. 1949. V. 17. P. 303.
2. Fisher M.//J. Phys. Soc. Japan. 1969. V. 26 (Suppl.). P. 44.
3. Alkhimov V.I.//Chem. Phys. Lett. 1972. V. 15. P. 86.

4. *Де Жен П.* Идеи скейлинга в физике полимеров. — М.: Мир, 1982.
5. *Ма Ш.* Современная теория критических явлений, — М.: Мир, 1980.
6. *Wilson K.G.*//Phys. Rev. B. 1971. V. 4. Pp. 3174, 3184.
7. *Wilson K.G.*//Phys. Rev. Lett. 1972. V. 28. P. 548.
8. *Kadanoff L.P.*//Physics, New York, 1966. V. 2. P. 263.
9. *Паташинский А.З., Покровский В.Л.* Флуктуационная теория фазовых переходов. — М.: Наука, 1982.
10. *Wilson K.G., Fisher M.*//Phys. Rev. Lett. 1972. V. 28. P. 240.
- [11] *De Gennes P.G.*//Phys. Lett. A. 1972. V. 38. P. 339.
12. *Вильсон К., Когут Дж.* Ренормализационная группа и ϵ -разложение. — М.: Мир, 1975.
13. *Gabay M., Corel T.*//J. de Phys. (Paris) Lett. 1978. T. 39. P. 123.
14. *Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р.* Статистическая физика макромолекул. — М.: Наука, 1989.
15. *Stueckelberg E.C.G., Peterman A.*//Helv. Phys. Acta. 1953. V. 26. P. 499.
16. *Gell-Mann M., Low F.*//Phys. Rev. 1954. V. 95. P. 1300.
17. *Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В.*//ДАН СССР. 1955. Т. 103. С. 203, 391.
18. *Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В.* Введение в теорию квантованных полей. — М.: Наука, 1984.
19. *Edwards S.F.*//Proc. Phys. Soc., London. 1965. V. 85. P. 613.
20. *Reiss H.*//J. Chem. Phys. 1967. V. 47. P. 186.
- [21] *Yamakawa H.*//Ibidem. 1968. V. 48. P. 3845.
22. *Yeh R., Isihara A.*//Ibidem. 1969. V. 51. P. 1215.
23. *Kosmas M., Freed K.F.*//Ibidem. 1978. V. 69. P. 3647.
24. *Des Cloizeaux J.*//J. de Phys., Paris. 1980. T. 41. P. L151.
25. *Westwater M.J.*//Commun. Math. Phys. 1980. V. 72. P. 131.
26. *Oono Y., Ohta T., Freed K.F.*//J. Chem. Phys. 1981. V. 74. P. 6458.
27. *Oono Y., Freed K.F.*//Ibidem. V. 75. P. 993.
28. *Des Cloizeaux J.*//J. de Phys., Paris. 1981. V. 42. P. 635.
29. *Elderfield D.J.*//J. Phys. A. 1981. V. 14. P. 1797.
30. *Des Cloizeaux J.*//J. de Phys., Paris. 1982. T. 43. P. 1743.
- [31] *Iti Hiroyuki* //Phys. Lett. A. 1983. V. 97. P. 325.
32. *Biman Bagchi, Oono Y.*//J. Chem. Phys. 1983. V. 78. P. 2044.
33. *Freed K.F., Kholodenko A.L.*//J. Stat. Phys. 1983. V. 30. P. 437.
34. *Stepanov S.*//Ann. d. Phys, 1983. Bd. 40. S. 301.
35. *Duplantier B.*//J. de Phys., Paris. 1986. V. 47. P. 569.
36. *Freed K.F.* Renormalization group theory of macromolecules. — New York: Willey, 1987.
37. *Чандрасекар С.* Стохастические проблемы в физике и астрономии. — М.: ИЛ, 1947.
38. *Алхимов В.И.*//ТМФ. 1976. Т. 29. С. 424.
39. *Титчмарш Е.* Теория функций. — М.: Наука, 1980.
40. *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. — М.: Мир, 1967.
- [41] *Алхимов В.И.*//ТМФ. 1979. Т. 39. С. 215.
42. *Brydges D., Spencer T.*//Commun. Math. Phys. 1985. V. 97. P. 125.
43. *Алхимов В.И.*//ТМФ. 1984. Т. 59. С. 413.
44. *Havlin S., Ben-Avraham D.*//J. Phys. A. 1982. V. 15. P. L317.
45. *Alkhimov V.I.*//Phys. Lett. A. 1988, V. 133. P. 15.
46. *Des Cloizeaux J.*//Phys. Rev. A. 1974. V. 10. P. 1665.
47. *McKenzie D.S.*//Phys. Rep. 1976. V. C27. P. 35.
48. *Menhuis B.*//Phys. Rev. Lett. 1982. V. 49. P. 1062.
49. *Pietronero L., Peliti L.*//Ibidem. 1985. V. 55. P. 1479.
50. *De Forcrand Ph., Koukiou F., Petritis D.*//J. Stat. Phys. 1987. V. 49. P. 223.
51. *Madras N., Sokal A.D.*//Ibidem. 1988. V. 50. P. 109.

Статья поступила 19.12.89 г.,
после доработки 18.06.91 г.