Лекция 6
Двумерная модель Изинга. Дуальность. Трансфер-матрица.

Сейчас мы начнем разбирать важный пример точно решаемой модели — двумерную модель Изинга со взаимодействием только ближайших соседей в нулевом внешнем поле. Но прежде всего рассмотрим еще более простую задачу — одномерную модель Изинга. Рассмотрим цепочку из N узлов. Энергия конфигурации $C = \{\sigma_i\}_{i=1}^N$ равна

$$E(C) = -\sum_{i=1}^{N}(I\sigma_i\sigma_{i+1} + h\sigma_i). \tag{1}$$

Здесь мы считаем, что $\sigma_{N+1} = \sigma_1$, то есть предполагаем *циклические граничные условия*. Запишем статсумму в виде

$$Z = \sum_C e^{-\beta E(C)} = \sum_{\sigma_1\dots\sigma_N}\prod_{i=1}^{N} e^{\beta I\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2}(\sigma_i+\sigma_{i+1})}.$$

Представим экспоненту под знаком произведения в виде матрицы

$$T = (T_\sigma^{\sigma'})_{\sigma,\sigma'=\pm}, \qquad T_\sigma^{\sigma'} = e^{\beta I\sigma'\sigma + \frac{\beta h}{2}(\sigma'+\sigma)}. \tag{2}$$

Тогда

$$Z = \operatorname{tr} T^N \tag{3}$$

Матрица T называется *трансфер-матрицей* (или *матрицей переноса*). Она играет огромную роль не только в теории точно решаемых моделей но и в приближенных численных методах. Предположим, что трансфер-матрицу можно диагонализовать:

$$T = U\Lambda U^{-1}, \qquad \Lambda = \begin{pmatrix}\Lambda_1 & 0\\ 0 & \Lambda_2\end{pmatrix}, \qquad \Lambda_1 \geq \Lambda_2.$$

Тогда, очевидно,

$$Z = \Lambda_1^N + \Lambda_2^N,$$

и при достаточно большом N первый член становится много больше второго, если $\Lambda_1 > \Lambda_2$, и оба члена равны, если $\Lambda_1 = \Lambda_2$. Следовательно

$$F \simeq -NT\log\Lambda_1, \qquad N \gg 1.$$

Значит, задача вычисления свободной энергии сводится к задаче диагонализации некоторой матрицы. В этом смысле задача похожа на двухуровневую задачу квантовой механики. Аналогия с квантовой механикой становится еще более очевидной, если заметить, что матрицу T можно рассматривать как оператор эволюции на единичное время в двумерном комплексном пространстве. Задача вычисления корреляционных функций сводится к вычислению среднего по основному состоянию:

$$\langle\sigma_m\sigma_{m+n}\rangle = \frac{\operatorname{tr}(T^{N-n-m}\sigma^z T^n \sigma^z T^m)}{\operatorname{tr} T^N} \simeq \frac{\langle\Lambda_1|T^{N-n-m}\sigma^z T^n\sigma^z T^m|\Lambda_1\rangle}{\langle\Lambda_1|T^N|\Lambda_1\rangle}, \qquad m, N-n-m \gg 1. \tag{4}$$

Здесь $\sigma^z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$ — третья матрица Паули, а $|\Lambda_i\rangle$ — собственные векторы трансфер-матрицы с собственными значениями Λ_i.

Диагонализуем трансфер-матрицу явно. Имеем

$$T = \begin{pmatrix}a & c\\ c & b\end{pmatrix}, \qquad a = e^{\beta(I+h)}, \qquad b = e^{\beta(I-h)}, \qquad c = e^{-\beta I}.$$

Диагонализуя, получаем

$$\Lambda_{1,2} = e^{\beta I}\left(1 \pm \sqrt{\operatorname{sh}^2\beta h + e^{-4\beta I}}\right).$$

Мы видим, что собственные значения не имеют особенностей ни при каких конечных I и h и, как и следует в квантовой механике с конечным числом степеней свободы, два собственных значения нигде не совпадают. Это подтверждает вывод об отсутствии фазовых переходов в одномерной системе.

Чему мы научились на этой простой модели? Мы выяснили, что задачу вычисления статсуммы можно свести к задаче диагонализации некоторого оператора. Вообще, d-мерная решеточная модель «классической» статистической механики с достаточно локальным взаимодействием эквивалентно $(d-1)$-мерной решеточной модели квантовой механики. Отсюда, в частности, ясно, что отсутствие фазового перехода в одномерной модели эквивалентно известной теореме о невырожденности основного состояния в квантовой механике. Фазовый переход в статистической физике, таким образом, связан с известным в теории поля явлением спонтанного нарушения симметрии.

Рассмотрим теперь двумерную модель Изинга на квадратной решетке $\mathcal{L}$ со взаимодействием ближайших соседей в нулевом внешнем поле:

$$E(C) = -\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{N}(I\sigma_{ij}\sigma_{i+1,j} + J\sigma_{ij}\sigma_{i,j+1}). \tag{5}$$

Мы будем предполагать циклические граничные условия. Для удобства мы будем использовать обозначения

$$K = \beta I, \qquad L = \beta J. \tag{6}$$

Рассмотрим дуальную решетку $\mathcal{L}'$ к решетке $\mathcal{L}$ в следующем смысле. В центр каждой грани решетки $\mathcal{L}$ помещаем узел решетки $\mathcal{L}'$, а каждое ребро решетки $\mathcal{L}$ будет пересекаться с ребром решетки $\mathcal{L}'$, соединяющим соседние вершины. Для квадратной решетки $\mathcal{L}$ дуальная решетка — это решетка с узлами в точках $\boldsymbol{r}^* = (i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2})$ и ребрами, перпендикулярными ребрам решетки $\mathcal{L}$.

Каждой конфигурации C спинов на решетке $\mathcal{L}$ сопоставим некоторый граф на дуальной решетке следующим образом. Проведем на дуальной решетке линии по тем ребрам, которые разделяют узлы исходной решетки с разными спинами. Понятно, что полученный граф будет графом доменных стенок. Пусть в графе P имеется $r(P)$ горизонтальных линий и $s(P)$ вертикальных. Запишем статсумму через сумму по таким графам:

$$Z(K,L) = 2e^{MN(K+L)}\sum_P e^{-2Ks(P)-2Lr(P)}. \tag{7}$$

Коэффициент 2 возник оттого, что каждому графу отвечает две вырожденные конфигурации спинов, отличающиеся знаком. Это уже знакомое нам низкотемпературное разложение.

Теперь попробуем построить высокотемпературное разложение. Прежде всего, отметим, что

$$e^{K\sigma\sigma'} = \operatorname{ch} K + \sigma\sigma' \operatorname{sh} K, \qquad e^{L\sigma\sigma'} = \operatorname{ch} L + \sigma\sigma' \operatorname{sh} L, \qquad \sigma,\sigma' = \pm 1.$$

Следовательно,

$$Z(K,L) = (\operatorname{ch} K \operatorname{ch} L)^{MN}\sum_C\prod_{i,j}(1+v\sigma_{ij}\sigma_{i+1,j})(1+w\sigma_{ij}\sigma_{i,j+1}), \qquad v = \operatorname{th} K, \qquad w = \operatorname{th} L. \tag{8}$$

Раскроем теперь все скобки в произведениях. Произведение распадется в сумму 2^{2MN} слагаемых, которые можно взаимно-однозначно сопоставить с графами на исходной решетке $\mathcal{L}$. Каждому члену $v\sigma_{ij}\sigma_{i+1,j}$ ($w\sigma_{ij}\sigma_{i,j+1}$) сопоставляем горизонтальную (вертикальную) линию. Пусть имеется r горизонтальных и s вертикальных линий. Тогда член суммы имеет вид

$$v^r w^s \prod_{\text{линии } (ij)-(i'j')}\sigma_{ij}\sigma_{i'j'}.$$

Теперь просуммируем по конфигурациям спинов C. После этого выживут только те слагаемые, которые содержат только четные степени каждой переменной σ_{ij}. Это значит, что в каждой вершине должно встречаться нуль, две или четыре линии. Эти графы в точности совпадают с графами P, но только строятся они на решетке $\mathcal{L}$, а не $\mathcal{L}'$. Поэтому статсумма равна

$$Z(K,L) = (2\operatorname{ch} K \operatorname{ch} L)^{MN}\sum_P v^{r(P)}w^{s(P)}. \tag{9}$$

Это разложение представляет собой высокотемпературное разложение, так как $v, w \to 0$ при $K, L \to \infty$, то есть при $T \to \infty$. Теперь запишем переменные v, w в виде экспонент:

$$v = e^{-2L^*}, \qquad w = e^{-2K^*},$$

то есть

$$\operatorname{th} K = e^{-2L^*}, \qquad \operatorname{th} L = e^{-2K^*} \tag{10}$$

или более симметрично

$$\operatorname{sh} 2K \operatorname{sh} 2L^* = 1, \qquad \operatorname{sh} 2L \operatorname{sh} 2K^* = 1. \tag{10a}$$

Тогда формально суммы в выражениях (7) и (9) не отличаются друг от друга. Следовательно,

$$Z(K, L) = 2(\operatorname{sh} 2K \operatorname{sh} 2L)^{MN/2} Z(K^*, L^*). \tag{11}$$

Это соотношение связывает статсуммы в низкотемпературной и высокотемпературной области. Имеется самодуальная линия, где $K = K^*$, $L = L^*$, которая дается уравнением

$$\operatorname{sh} 2K \operatorname{sh} 2L = 1. \tag{12}$$

Рассмотрим сначала изотропный случай $I = J$. Самодуальная точка $K = K_c$ в этом случае определяется условием

$$\operatorname{sh} 2K_c = 1, \qquad K_c \simeq= 0.44069.$$

Ей соответствует температура

$$T_c = \frac{I}{K_c} \simeq 2.26919 I.$$

Условие дуальности отображает любую точку $T < T_c$ в точку $T^* > T_c$. Поэтому, если в системе имеется только один фазовый переход (это предположение оправдается), то его температура равна T_c. Заметим, что точная критическая температура заметно ниже значения $4I$, предсказываемого теорией среднего поля.

В общем случае должна иметься линия критических точек. Если $K > L$, то и $K^* > L^*$. Поэтому если имеется линия критических точек, начинающаяся в точке $K = L = K_c$ и идущая в область $K > L$, скажем над самодуальной кривой, то и дуальная ей линия будет находится в области $K > L$ под самодуальной кривой. Поэтому если имеется только одна линия критических точек, то она должна совпадать с самодуальной кривой (12). Следовательно, критическая температура при общих значениях I и J дается условием

$$\operatorname{sh} \frac{2I}{T_c} \operatorname{sh} \frac{2J}{T_c} = 1. \tag{13}$$

Попробуем разобраться в явлении дуальности несколько глубже. Пусть n — четное число, а $\boldsymbol{r}_1^*, \dots, \boldsymbol{r}_n^*$ — набор точек на дуальной решетке $\mathcal{L}'$. Соединим эти точки попарно линиями по ребрам дуальной решетки. Обозначим получившийся граф на $\mathcal{L}'$ через $\mathcal{M}$. Обозначим множество ребер решетки $\mathcal{L}$, пересекающие эти линии, через $\mathcal{M}'$. Пусть

$$E(\mathcal{M}|C) = -\sum_{i,j} \left(I_{ij} \sigma_{ij} \sigma_{i+1,j} + J_{ij} \sigma_{ij} \sigma_{i,j+1} \right),$$

$$I_{ij} = \begin{cases} I, & <(i,j),(i+1,j)> \notin \mathcal{M}', \\ -I, & <(i,j),(i+1,j)> \in \mathcal{M}', \end{cases} \qquad J_{ij} = \begin{cases} J, & <(i,j),(i,j+1)> \notin \mathcal{M}', \\ -J, & <(i,j),(i,j+1)> \in \mathcal{M}'. \end{cases}$$

То есть на линиях $\mathcal{M}$ константа связи меняет знак. Покажем теперь, что статсумма, связанная с этим функционалом энергии, является функцией только точек $\boldsymbol{r}_1^*, \dots, \boldsymbol{r}_n^*$, а не всего графа $\mathcal{M}$:

$$Z(K, L; \boldsymbol{r}_1^*, \dots, \boldsymbol{r}_n^*) = \sum_C e^{-\beta E(\mathcal{M}|C)}. \tag{14}$$

Действительно, изменять граф $\mathcal{M}$ можно добавлением единичных квадратиков вокруг узлов. Две линии по одному ребру при этом будут аннигилировать друг друга. Найдем вклад единичного квадратика в энергию. Он равен

$$I\sigma_{ij}(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j}) + J\sigma_{ij}(\sigma_{i,j+1} + \sigma_{i,j-1}),$$

что отличается знаком от вклада узла, не окруженного квадратиком. Изменим теперь знак спина в центре квадратика: $\sigma_{ij} \to -\sigma_{ij}$. Вклад в энергию изменит знак. Таким образом статсумма, содержащая суммирование по $\sigma_{ij} = \pm 1$, совпадает со статсуммой без квадратика. Определим среднее

$$\langle \mu(\boldsymbol{r}_1^*) \ldots \mu(\boldsymbol{r}_n^*) \rangle_{K,L} = \frac{Z(K, L; \boldsymbol{r}_1^*, \ldots, \boldsymbol{r}_n^*)}{Z(K, L)}. \tag{15}$$

Можно доказать что, что

$$\langle \mu(\boldsymbol{r}_1^*) \ldots \mu(\boldsymbol{r}_n^*) \rangle_{K,L} = \langle \sigma(\boldsymbol{r}_1^*) \ldots \sigma(\boldsymbol{r}_n^*) \rangle'_{K^*,L^*}. \tag{16}$$

При этом мы считаем, что модель Изинга в правой части этого выражения живет на дуальной решетке, что подчеркнуто штрихом у правой угловой скобки.

Полное доказательство этого факта оставим на дом (Задача 2), а здесь приведем лишь простой пример, когда $n = 2$ и $\boldsymbol{r}_1^*$ и $\boldsymbol{r}_2^*$ — соседние узлы, например, в одной строке дуальной решетки. Очевидно, что на ребрах графа $\mathcal{M}$ величины v, w в статсумме, записанной в виде (8), меняют знак. В нашем простом примере это означает, что меняют знак все слагаемые для графов P в выражении (9), содержащих ребро исходной решетки $\mathcal{L}$, перпендикулярное ребру $< \boldsymbol{r}_1^*, \boldsymbol{r}_2^* >$ дуальной решетки. Но это ребро решетки $\mathcal{L}$ в интерпретации статсуммы в виде (7) является как раз доменной стенкой, разделяющей спины разных знаков. Таким образом знак «минус» приписывается как раз членам, для которых знаки переменных $\sigma_{\boldsymbol{r}_1^*}$ и $\sigma_{\boldsymbol{r}_2^*}$ в различны. Но это и есть числитель среднего $\langle \sigma_{\boldsymbol{r}_1^*} \sigma_{\boldsymbol{r}_2^*} \rangle'$.

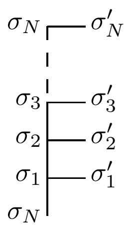
Выражение (15) можно обобщить. Давайте определим

$$\langle \sigma(\boldsymbol{r}_1) \ldots \sigma(\boldsymbol{r}_m) \mu(\boldsymbol{r}_1^*) \ldots \mu(\boldsymbol{r}_n^*) \rangle_{K,L} = \frac{1}{Z(K, L)} \sum_C \sigma(\boldsymbol{r}_1) \ldots \sigma(\boldsymbol{r}_m) e^{-\beta E(\mathcal{M}|C)}. \tag{17}$$

Это обозначение не совсем последовательно. Дело в том, что такие корреляционные функции *зависят* от $\mathcal{M}$, но меняются, только если линии, соединяющие точки $\boldsymbol{r}_i^*$, пересекают какую-либо из точек $\boldsymbol{r}_j$. Тем не менее, при таком пересечении корреляционная функция просто меняет знак. Таким образом, мы можем рассматривать корреляционную функцию (17) как корреляционную функцию *переменных порядка* $\sigma(\boldsymbol{r})$ и *переменных беспорядка* $\mu(\boldsymbol{r}^*)$, которые не взаимно-локальны друг с другом. В окрестности критической точки это должно означать, что имеется два набора полей $\sigma(x_i)$ и $\mu(y_j)$, причем корреляционная функция имеет разрезы, так что она меняет знак при обходе x_i вокруг y_j по замкнутому контуру.

Давайте сформулируем полученные результаты на операторном языке, подобно тому, как мы это сделали в случае одномерной цепочки Изинга. Рассмотрим один столбец вертикальных и один столбец решетки, состоящий из N вертикальный и N горизонтальных ребер с циклическим граничным условием по вертикали:

$$T^{\sigma'_1 \sigma'_2 \ldots \sigma'_N}_{\sigma_1 \sigma_2 \ldots \sigma_N} =$$



$$= \prod_{j=1}^{N} e^{K\sigma_j \sigma'_j + L\sigma_j \sigma_{j+1}}. \tag{18}$$

Совокупность чисел $T^{\sigma'_1 \ldots \sigma'_N}_{\sigma_1 \ldots \sigma_N}$ будем рассматривать как матрицу T размерности $2^N \times 2^N$ или оператор в пространстве

$$\mathcal{H}_{\mathrm{qu}} = V_1 \otimes \ldots \otimes V_N, \text{ где } V_i \simeq \mathbb{C}^2.$$

Как и в случае одномерной цепочки Изинга, имеем для статсуммы

$$Z(K, L) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_{\mathrm{qu}}} T^M. \tag{19}$$

Если трансфер-матрицу можно диагонализовать,

$$T = U \operatorname{diag}(\Lambda_1, \Lambda_2, \ldots, \Lambda_{2^N}) U^{-1}, \qquad \Lambda_1 \geq \Lambda_2 \geq \cdots \geq \Lambda_{2^N},$$

вычисление статсуммы в пределе $M \to \infty$ сводится к вычислению наибольшего собственного значения Λ_1:

$$Z(K, L) \simeq n_1 \Lambda_1^M,$$

где n_1 — степень вырождения собственного значения Λ_1.

Здесь есть некоторая тонкость. Нужно проверить, что эта формула верна в пределе $M, N \to \infty$, $M/N = \mathrm{const}$. Для этого следует оценить расщепление самых больших собственных значений.

Определим два набора операторов:

$$\sigma_j = \sigma_i^z = \underbrace{1 \otimes \cdots \otimes 1}_{j-1} \otimes \sigma^z \otimes \underbrace{1 \otimes \cdots \otimes 1}_{N-j}, \tag{20}$$

$$\mu_{j^*} = \prod_{k=1}^{j^*-1/2} \sigma_k^x = \underbrace{\sigma^x \otimes \cdots \otimes \sigma^x}_{j^*-1/2} \otimes \underbrace{1 \otimes \cdots \otimes 1}_{N-j^*+1/2}. \tag{21}$$

Здесь $\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ — первая матрица Паули. Оператор σ_j под знаком следа справа от iй трансфер-матрицы вставляет переменную $\sigma(\boldsymbol{r})$ в точку $\boldsymbol{r} = (i, j)$. Оператор μ_{j^*} в той же позиции вставляет произведение $\mu(\boldsymbol{r}_0)\mu(\boldsymbol{r})$ с $\boldsymbol{r}_0 = (i - 1/2, 1/2)$, $\boldsymbol{r} = (i - 1/2, j^*)$ и линией по прямой между ними. То есть операторы σ_j и μ_{j^*} представляют собой операторы порядка и беспорядка соответственно.

Рассмотрим коммутационные соотношения между этими операторами. Из коммутационных соотношений для матриц Паули следует, что

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_j \sigma_i, \qquad \mu_{i^*} \mu_{j^*} = \mu_{j^*} \mu_{i^*}, \qquad \sigma_i \mu_{j^*} = \mathrm{sign}(i - j^*) \mu_{j^*} \sigma_i. \tag{22}$$

Введем операторы

$$\psi_j^1 = \sigma_j \mu_{j-1/2}, \qquad \psi_j^2 = -\mathrm{i} \sigma_j \mu_{j+1/2}. \tag{23}$$

Легко видеть, что эти операторы удовлетворяют соотношениям фермионной алгебры (*алгебры Клиффорда*:

$$\psi_i^\alpha \psi_j^\beta + \psi_j^\beta \psi_j^\alpha = 2\delta^{\alpha\beta} \delta_{ij}. \tag{24}$$

Удобнее пользоваться переменными

$$a_j = \frac{1}{2}(\psi_j^1 - \mathrm{i}\psi_j^2), \qquad a_j^+ = \frac{1}{2}(\psi_j^1 + \mathrm{i}\psi_j^2) \tag{25}$$

с привычными антикоммутационными соотношениями

$$[a_i, a_j]_+ = [a_i^+, a_j^+]_+ = 0, \qquad [a_i, a_j^+]_+ = 1.$$

В следующей лекции мы воспользуемся этими фермионными операторами, чтобы диагонализовать трансфер-матрицу модели Изинга.

Задачи

1. Найти корреляционную функцию (4) в термодинамическом пределе $(n, N \to \infty)$ одномерной модели Изинга. Найти зависимость корреляционной длины от температуры и внешнего поля.

2. Доказать соотношение (16).