Лекция 1
Двумерная модель Изинга

В этой лекции мы рассмотрим двумерную модель Изинга и ее решение, предложенное Онзагером в 1944 г.

Рассмотрим двумерную решетку размера $M \times N$ с узлами, нумеруемыми парами целых чисел (m, n). В каждой вершине поместим 'спиновую' переменную $\sigma_{mn} = \pm 1 \equiv \pm$. *Конфигурацией* C будем называть совокупность значений спиновых переменных на всех узлах $\{\sigma_{mn}\}$. Предположим, что статистический вес $W(C)$ конфигурации C определяется формулой

$$W(C) = e^{-\beta E(C)}, \qquad \beta E(C) = -\sum_{m,n} (J\sigma_{mn}\sigma_{m+1\,n} + K\sigma_{mn}\sigma_{m\,n+1}). \tag{1}$$

При этом будет предполагаться подходящее условие на границах решетки, например циклическое

$$\sigma_{M+1\,n} = \sigma_{1n}, \qquad \sigma_{m\,N+1} = \sigma_{m1}. \tag{2}$$

Нас будет интересовать, в конечном счете, термодинамический предел $M, N \to \infty$, поэтому граничное условие не будет играть большой роли и мы при необходимости его изменим.

Наша задача — вычислить статистическую сумму $Z_{MN}(J, K)$ данной модели и найти предел $f(J, K) = -\frac{1}{MN} \lim_{M,N\to\infty} \log Z_{MN}(J, K)$. Мы будем рассматривать случай 'ферромагнитного' взаимодействия $J, K > 0$. Три других случая тривиально отображаются на этот при четных M, N.

Давайте для начала введем важное понятие трансфер-матрицы. Рассмотрим n-й ряд решетки $\{\sigma_1, \ldots, \sigma_M\}$ (индекс n мы для простоты опускаем) и $n+1$-й ряд $\{\sigma'_1, \ldots, \sigma'_M\}$. Возьмем все горизонтальные ребра n-го ряда и все вертикальные ребра, соединяющие n-й и $n+1$-й ряды и вычислим их вклад в больцмановский вес $W(C)$:

$$T_\sigma^{\sigma'} \equiv T_{\{\sigma_1,\ldots,\sigma_M\}}^{\{\sigma'_1,\ldots,\sigma'_M\}} = \exp \sum_{m=1}^{M} (J\sigma_m\sigma_{m+1} + K\sigma_m\sigma'_m). \tag{3}$$

Эти веса удобно рассматривать как матрицу с индексами σ' и σ, именуемую *трансфер-матрицей*. Статистическая сумма выражается через трансфер-матрицу в виде

$$Z_{MN} = \operatorname{Tr} T^N. \tag{4}$$

Задача вычисления статистической суммы сводится к задаче диагонализации трансфер-матрицы, т. к. если $\Lambda_1 \geq \ldots \geq \Lambda_{\mathcal{N}}$ $(\mathcal{N} = 2^N)$, то

$$Z_{MN} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \lambda_i^N.$$

Более того, в пределе $N \to \infty$ имеем

$$Z_{MN} = g\Lambda_1^N,$$

где g — степень вырождения старшего собственного значения, а в термодинамическом пределе

$$f = -\log \Lambda_1. \tag{5}$$

Трансфер-матрицу модели Изинга удобно разбить в произведение двух матриц $T = V_0 V_1$,

$$(V_0)_\sigma^{\sigma'} = e^{K\sum_{m=1}^M \sigma_m\sigma'_m}, \tag{6}$$

$$(V_1)_\sigma^{\sigma'} = e^{J\sum_{m=1}^M \sigma_m\sigma_{m+1}}. \tag{7}$$

Выразим теперь эти матрицы через матрицы Паули σ_m^i, действующие в соответствующих двумерных пространствах. Для V_1 это тривиально:

$$V_1 = e^{J\sum_{m=1}^M \sigma_m^z\sigma_{m+1}^z}. \tag{8}$$

Для V_0 это несколько сложнее. Рассмотрим экспоненту $e^{K^*\sigma^x}$ с некоторой константой K^*. Получаем

$$e^{K^*\sigma^x}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(K^*\sigma^x)^k}{k!}=\sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{K^{*2k}}{(2k)!}+\frac{K^{*2k+1}\sigma^x}{(2k+1)!}\right)=\operatorname{ch}K^*+\sigma^x\operatorname{sh}K^*=\begin{pmatrix}\operatorname{ch}K^* & \operatorname{sh}K^*\\ \operatorname{sh}K^* & \operatorname{ch}K^*\end{pmatrix}.$$

Но матрица V_0 есть тензорное произведение матриц вида $\begin{pmatrix}e^{K} & e^{-K}\\ e^{-K} & e^{K}\end{pmatrix}$. Таким образом, если

$$\operatorname{th}K^*=e^{-2K}, \tag{9}$$

то с точностью до числового коэффициента обе матрицы 2×2 совпадают. Отсюда

$$V_0=(2\operatorname{sh}2K)^{M/2}e^{K^*\sum_{m=1}^{M}\sigma_m^x}.$$

Отметим, что отображение $K\mapsto K^*$ инволютивно, т. е. $(K^*)^*=K$.

Удобно ввести операторы Онзагера

$$A_0=\sum_{m=1}^{M}\sigma_m^x,\qquad A_1=\sum_{m=1}^{M}\sigma_m^z\sigma_{m+1}^z. \tag{10}$$

Эти операторы образуют некоторую сложную алгебру, изучая представления которой, можно найти спектр трансфер-матрицы. Однако более удобно действовать иначе. Заметим, что оператор A_0, тоже можно записать в виде, квадратичном по матрицам Паули:

$$A_0=-i(\sigma_m^y\sigma_m^z-\sigma_m^z\sigma_m^y).$$

Заметим, что матрицы Паули σ^z, σ^y удовлетворяют алгебре Клиффорда:

$$(\sigma^y)^2=(\sigma^z)^2=1,\qquad \{\sigma^y,\sigma^z\}=0.$$

Эту алгебру можно переписать в более привычном виде с помощью образующих

$$\tilde\sigma^{\pm}=\frac12(\sigma^z\pm i\sigma^y). \tag{11}$$

Именно,

$$\{\tilde\sigma^+,\tilde\sigma^-\}=1,\qquad (\tilde\sigma^+)^2=(\tilde\sigma^-)^2=0. \tag{12}$$

В этих обозначениях

$$\begin{aligned}A_0&=\sum_{m=1}^{M}(1-2\tilde\sigma_m^+\tilde\sigma_m^-),\\ A_1&=\sum_{m=1}^{M}(\tilde\sigma_m^++\tilde\sigma_m^-)(\tilde\sigma_{m+1}^++\tilde\sigma_{m+1}^-).\end{aligned} \tag{13}$$

Мы почти что выразили операторы A_i через фермионы. Единственная проблема состоит в том, что

$$[\tilde\sigma_m^\alpha,\tilde\sigma_{m'}^\beta]=0\qquad\text{при } m\neq m'.$$

Чтобы построить настоящие фермионы, введем *операторы беспорядка* μ_m, удовлетворяющие условиям

$$[\mu_m,\mu_{m'}]=0,\qquad \mu_m\tilde\sigma_{m'}^{\pm}=\begin{cases}\tilde\sigma_{m'}^{\pm}\mu_m & \text{при } m'\geq m,\\ -\tilde\sigma_{m'}^{\pm}\mu_m & \text{при } m'<m.\end{cases} \tag{14}$$

Обратим внимание на то, что

$$\sigma^x \tilde{\sigma}^{\pm} = -\tilde{\sigma}^{\pm}\sigma^x.$$

Отсюда находим

$$\mu_m = \prod_{j=1}^{m-1} \sigma_j^x = e^{i\pi \sum_{j=1}^{m} \tilde{\sigma}_j^+ \tilde{\sigma}_j^-}. \tag{15}$$

Определим фермионные операторы

$$\begin{aligned} a_m &= \mu_m \tilde{\sigma}_m^-, \\ a_m^+ &= \mu_m \tilde{\sigma}_m^+. \end{aligned} \tag{16}$$

Тогда

$$\begin{aligned} A_0 &= \sum_{m=1}^{M} (1 - 2a_m^+ a_m), \\ A_1 &= \sum_{m=1}^{M-1} (a_m^+ - a_m)(a_{m+1}^+ + a_{m+1}) - (a_M^+ - a_M)(a_1^+ + a_1) \prod_{j=1}^{M} (1 - 2a_j^+ a_j). \end{aligned} \tag{17}$$

Эти выражения квадратичны по a_m^+, a_m, за исключением последнего слагаемого в A_1. Но множитель $\prod(1 - 2a_j^+ a_j)$ равен $(-1)^{n_f}$, где n_f — число фермионов. Поэтому этот оператор можно тоже считать квадратичным. Но чтобы не углубляться в тонкости, связанные с этим членом, и поскольку нас на самом деле интересует только термодинамический предел, давайте возьмем упрощенное выражение для A_1:

$$A_1 = \sum_{m=1}^{M} (a_m^+ - a_m)(a_{m+1}^+ + a_{m+1}). \tag{18}$$

Это соответствует некоторой модификации граничного условия в модели Изинга.

Теперь воспользуемся трансляционной инвариантностью выражений для A_i. Разложим a_m в ряд Фурье

$$a_m = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_q e^{iqm} \eta_q, \qquad q = \frac{2\pi\nu}{M}, \qquad \nu = 0, 1, \ldots, M-1 \bmod M, \tag{19}$$

и подставим это выражение в A_i:

$$\begin{aligned} A_0 &= \sum_q (1 - 2\eta_q^+ \eta_q), \\ A_1 &= \sum_q (e^{iq} \eta_q^+ \eta_{-q}^+ - e^{-iq} \eta_q \eta_q^+ + e^{iq} \eta_q^+ \eta_q - e^{-iq} \eta_q \eta_{-q}). \end{aligned}$$

Мы видим, что в эти операторы волновые числа q и $-q \sim 2\pi - q$ входят парами. Поэтому удобно написать

$$A_i = \sum_{0 \le q < \pi} A_i(q),$$

причем

$$\begin{aligned} A_0(q) &= 2(1 - \eta_q^+ \eta_q - \eta_{-q}^+ \eta_{-q}), \\ A_1(q) &= 2(\eta_q^+ \eta_q + \eta_{-q}^+ \eta_{-q}) \cos q + 2i(\eta_q^+ \eta_{-q}^+ + \eta_q \eta_{-q}) \sin q - 2\cos q, \end{aligned}$$

при $q \neq 0$ и

$$\begin{aligned} &A_0(0) = 2(1 - \eta_0^+ \eta_0 - \eta_\pi^+ \eta_\pi), \quad &&A_1(0) = 2(\eta_0^+ \eta_0 - \eta_\pi^+ \eta_\pi) \quad &&\text{для четных } M \text{ и} \\ &A_0(0) = 1 - 2\eta_0^+ \eta_0, &&A_1(0) = 2\eta_0^+ \eta_0 - 1 &&\text{для нечетных } M. \end{aligned}$$

Это означает, что

$$T = (2\,\mathrm{sh}\, 2K)^{M/2} \prod_{0 \le q < \pi} T(q), \qquad T(q) = V_0(q) V_1(q),$$

где

$$V_0(q) = e^{K^* A_0(q)}, \qquad V_1(q) = e^{J A_1(q)}.$$

Все операторы $T(q)$ коммутируют друг с другом, так что задача диагонализайии T сводится к диагонализации матриц $T(q)$ размера 4×4. Определим вакуум $|0\rangle_q$ условием $\eta_q|0\rangle = 0$ при всех q. Введем базис

$$|++\rangle = |0\rangle, \quad |-+\rangle = \eta_q^+|0\rangle, \quad |+-\rangle = \eta_{-q}^+|0\rangle, \quad |--\rangle = \eta_q^+\eta_{-q}^+|0\rangle$$

при $q \neq 0$,

$$|++\rangle = |0\rangle, \quad |-+\rangle = \eta_0^+|0\rangle, \quad |+-\rangle = \eta_\pi^+|0\rangle, \quad |--\rangle = \eta_0^+\eta_\pi^+|0\rangle$$

при $q = 0$ и четном M и

$$|+\rangle = |0\rangle, \quad |-\rangle = \eta_0^+|0\rangle.$$

при $q = 0$ и нечетном M. В этом базисе матрицы A_i выглядят как

$$A_0(q) = \begin{pmatrix} 2 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & -2 \end{pmatrix}, \qquad A_1(q) = \begin{pmatrix} -2\cos q & & & -2i\sin q \\ & 0 & 0 & \\ & 0 & 0 & \\ 2i\sin q & & & 2\cos q \end{pmatrix}.$$

при $q \neq 0$ и

$$A_0(0) = \begin{pmatrix} 2 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & -2 \end{pmatrix}, \qquad A_1(0) = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 2 & & \\ & & -2 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \qquad (M \text{ — четное}),$$

$$A_0(0) = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}, \qquad A_1(0) = \begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix} \qquad (M \text{ — нечетное}),$$

Эти матрицы удобно рассматривать как блочные, причем пространство $\mathbf{C}^4$ распадается в сумму двух двумерных $(\mathbf{C}|++\rangle \oplus \mathbf{C}|--\rangle) \oplus (\mathbf{C}|-+\rangle \oplus \mathbf{C}|+-\rangle)$. Тогда в первом пространстве

$$A_0^{(1)}(q) = A_0^{(1)}(0) = 2\sigma^z, \qquad A_1^{(1)}(q) = 2\sigma^y \sin q - 2\sigma^z \cos q, \qquad A_1^{(1)}(0) = 0.$$

Во втором пространсте

$$A_0^{(2)}(q) = A_0^{(2)}(0) = 0, \qquad A_1^{(2)}(q) = 0, \qquad A_1^{(2)}(0) = 2\sigma^z.$$

При нечетных M имеем

$$A_0(0) = -A_1(0) = \sigma^z.$$

В таком виде легко взять экспоненты от этих операторов. В первом пространстве

$$V_0^{(1)}(q) = e^{2K^*\sigma^z} = \operatorname{ch} 2K^* + \sigma^z \operatorname{sh} 2K^* = \begin{pmatrix} e^{2K^*} & \\ & e^{-2K^*} \end{pmatrix},$$

$$V_1^{(1)}(q) = e^{2J(\sigma^y \sin q - \sigma^z \cos q)} = \operatorname{ch} 2J + (\sigma^y \sin q - \sigma^z \cos q) \operatorname{sh} 2J$$

$$= \begin{pmatrix} \operatorname{ch} 2J - \operatorname{sh} 2J \cos q & -i \operatorname{sh} 2J \sin q \\ i \operatorname{sh} 2J \sin q & \operatorname{ch} 2J + \operatorname{sh} 2J \cos q \end{pmatrix}.$$

Отсюда

$$T^{(1)}(q) = \begin{pmatrix} e^{2K^*}(\operatorname{ch} 2J - \operatorname{sh} 2J \cos q) & -ie^{2K^*} \operatorname{sh} 2J \sin q \\ ie^{-2K^*} \operatorname{sh} 2J \sin q & e^{-2K^*}(\operatorname{ch} 2J + \operatorname{sh} 2J \cos q) \end{pmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы равны $\lambda_{1,2}(q) = e^{\pm\varepsilon(q)}$, где

$$\operatorname{ch} \varepsilon(q) = \operatorname{ch} 2K^* \operatorname{ch} 2J - \operatorname{sh} 2K^* \operatorname{sh} 2J \cos q. \tag{20}$$

На втором пространстве $T^{(2)}(q) = 1$ за исключением точки $q = 0$, где $T^{(2)}(q) = e^{2J\sigma^z}$ и $\lambda_{3,4}(0) = e^{\pm 2J}$.

Спектр собственных значений трансфер-матрицы удобно записать в виде

$$\Lambda(\vec{\alpha}) = (2 \operatorname{sh} 2K)^{M/2} \exp \sum_q \alpha_q \frac{\varepsilon(q)}{2}. \tag{21}$$

Здесь $\alpha_q = \pm$.

Задача. *Показать, что моды $q = 0, \pi$ учтены таким способом правильно.*

Это означает, что имеются фермионные поля ξ_q, ξ_q^+, такие что

$$T = (2\operatorname{sh} 2K)^{M/2} e^{-\sum_q \varepsilon(q)\left(\xi_q^+\xi_q - \frac{1}{2}\right)}.$$

Можно показать, что фермионные моды ξ_q, ξ_q^+ получаются из мод η_q, η_q^+ преобразованием Боголюбова.

Наибольшему собственному значению Λ_1 отвечает, очевидно, случай $\alpha_\nu = +$ для всех ν. Следовательно, наиболшее собственное значение равно

$$\Lambda_1 = (2\operatorname{sh} 2K)^{M/2} e^{\frac{1}{2}\sum_{0\le q<2\pi} \varepsilon(q)}, \tag{22}$$

а свободная энергия (умноженная на β) в термодинамическом пределе имеет вид

$$f = -\frac{1}{2}\log(2\operatorname{sh} 2K) - \int_0^\pi \frac{dq}{2\pi}\ \operatorname{Arch}(\operatorname{ch} 2K^* \operatorname{ch} 2J - \operatorname{sh} 2K^* \operatorname{sh} 2J \cos q). \tag{23}$$

Точка фазового перехода связана с особенностью свободной энергии. Если

$$\operatorname{ch} 2K^* \operatorname{ch} 2J - \operatorname{sh} 2K^* \operatorname{sh} 2J \equiv \operatorname{ch} 2(K^* - J) > 1,$$

подынтегральное выражение не имеет особенностей и функция f аналитична. Однако при $K^* \to J$ подынтегральное выражение ведет себя как $|K^* - J|$ при $q = 0$. Это может свидетельствовать об особенности свободной энерии при

$$K^* = J \tag{24}$$

или, эквивалентно, при

$$K = J^*.$$

Можно показать, что особенность свободной энергии $\sim (K^* - J)^2 \log|K^* - J|$ или $(T - T_c)^2 \log|T - T_c|$, т. е. она очень слабая и существенно проявляется лишь в теплоемкости $C \sim \log|T - T_c|$.

Эти результаты можно проиллюстрировать следующим образом. Пусть $\boldsymbol{x} = (m, n)$ обозначает узел решетки, а $\boldsymbol{x}_* = (m + 1/2, n + 1/2)$ — узел *дуальной* решетки. Положим $\sigma(\boldsymbol{x}) = \sigma_{mn}$. Поле беспорядка $\mu(\boldsymbol{x}_*)$ определим как вставку, которая меняет знаки взаимодействия на всех ребрах слева от $\boldsymbol{x}_*$. Введем векторы $\boldsymbol{\delta}_1 = (1, 0)$, $\boldsymbol{\delta}_2 = (0, 1)$, $\boldsymbol{\delta}_3 = (-1, 0)$, $\boldsymbol{\delta}_4 = (0, -1)$, $\boldsymbol{e}_1 = (1/2, 1/2)$, $\boldsymbol{e}_2 = (-1/2, 1/2)$, $\boldsymbol{e}_3 = (-1/2, -1/2)$, $\boldsymbol{e}_4 = (1/2, -1/2)$. Положим также $J_1 = J_3 = J$, $J_2 = J_4 = K$. Введем поля

$$\psi_a(\boldsymbol{x}) = \sigma(\boldsymbol{x})\mu(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e}_a), \qquad \psi_{a+4}(\boldsymbol{x}) = -\psi_a(\boldsymbol{x}). \tag{25}$$

Задача. *Покажите, что поле $\psi_a(\boldsymbol{x})$ удовлетворяет уравнению*

$$\psi_a(\boldsymbol{x}) = \psi_{a+1}(\boldsymbol{x}) \operatorname{ch} 2J_{a+1} - \psi_{a+2}(\boldsymbol{x} + \delta_{a+1}) \operatorname{sh} 2J_{a+1}. \tag{26}$$

Это уравнение играет роль дискретного уравнения Дирака для поля $\psi_a(\boldsymbol{x})$.

Задача. *Покажите, что постоянное по $\boldsymbol{x}$ решение уравнения (26) имеется при условии (24). Покажите, что медленно меняющиеся решения вблизи этой точки выражаются через две функции $u_\pm$, удовлетворяющие непрерывному уравнению Дирака:*

$$\begin{aligned}
&(\partial_1 + i\partial_2)u_+ = imu_-,\\
&(\partial_1 - i\partial_2)u_- = imu_+,\\
&m \sim K^* - J.
\end{aligned}$$

Статистическую сумму для модели Изинга можно выразить через гауссов интеграл по антикоммутирующим переменным $\psi_q(\boldsymbol{x})$.