



Точное решение Онсагера двумерной модели Изинга

Вопрос по выбору на экзамен по общей физике

Драчев Ярослав

Московский физико-технический институт

19 июня 2021 г.

Рассматриваемая модель представляет собой плоскую квадратную решётку, состоящую из N узлов, в каждом из которых находится «диполь» с осью, перпендикулярной к плоскости решётки. Диполь может иметь две противоположные ориентации, так что общее число возможных конфигураций диполей равно 2^N .

С каждым узлом решётки (с целочисленными координатами k, l) свяжем переменную σ_{kl} , принимающую два значения ± 1 , соответствующие двум возможным ориентациям диполя.

Энергия

$$E(\sigma) = -J \sum_{k, l=1}^L (\sigma_{kl} \sigma_{kl+1} + \sigma_{kl} \sigma_{k+1l}),$$

где L — число узлов в ребре решётки ($N = L^2$), а J — величина энергии взаимодействия пары соседних диполей.

Статистическая сумма

$$Z = \sum_{(\sigma)} e^{-E(\sigma)/T} = \sum_{(\sigma)} \exp \left[\theta \sum_{k,l} (\sigma_{kl} \sigma_{kl+1} + \sigma_{kl} \sigma_{k+1l}) \right],$$

где суммирование происходит по всем 2^N возможным конфигурациям, а также $\theta = J/T$.

Т. к. $\sigma_{kl}^2 = 1$, то раскладывая экспоненту в ряд по степеням θ получаем точное равенство

$$\exp(\theta \sigma_{kl} \sigma_{k'l'}) = \operatorname{ch} \theta + \sigma_{kl} \sigma_{k'l'} \operatorname{sh} \theta = \operatorname{ch} \theta (1 + \sigma_{kl} \sigma_{k'l'} \operatorname{th} \theta).$$

Поэтому

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{(\sigma)} \exp \left[\theta \sum_{k,l} (\sigma_{kl} \sigma_{kl+1} + \sigma_{kl} \sigma_{k+1l}) \right] = \\ &= (1 - x^2)^{-N} \sum_{(\sigma)} \prod_{k,l=1}^L (1 + x \sigma_{kl} \sigma_{kl+1}) (1 + x \sigma_{kl} \sigma_{k+1l}), \end{aligned}$$

где $x = \operatorname{th} \theta$.

Итак,

$$Z = (1 - x^2)^{-N} \sum_{(\sigma)} \prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}).$$

Последнее выражение можно переписать в виде

$$Z = (1 - x^2)^{-N} S,$$

где

$$S = \sum_{(\sigma)} \prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}).$$

Под знаком суммы

$$S = \sum_{(\sigma)} \prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l})$$

имеем

$$\prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l})$$

— полином по переменным x и σ_{kl} .

Имеем

$$\prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}).$$

Заметим, что

- каждое σ_{kl} может встретиться в данном полиноме в степенях от нулевой до четвертой.

Имеем

$$\prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}).$$

Заметим, что

- после взятия суммы

$$S = \sum_{(\sigma)} \prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l})$$

по всем $\sigma_{kl} = \pm 1$ члены, содержащие нечётные степени σ_{kl} , обратятся в нуль, так что ненулевой вклад дадут только члены, содержащие σ_{kl} в степенях 0, 2, и 4.

Имеем

$$\prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}).$$

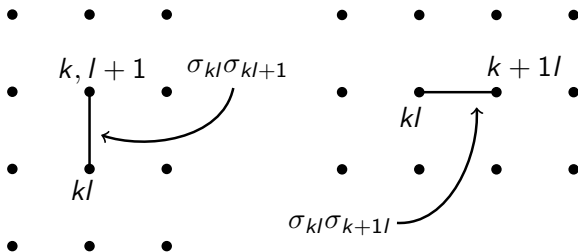
Заметим, что

- т. к. $\sigma_{kl}^0 = \sigma_{kl}^2 = \sigma_{kl}^4 = 1$, то каждый член полинома, содержащий все переменные σ_{kl} в чётных степенях, даст вклад в сумму S , пропорциональный числу конфигураций 2^N (после суммирования по всем конфигурациям (σ)).

Имеем

$$\prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}).$$

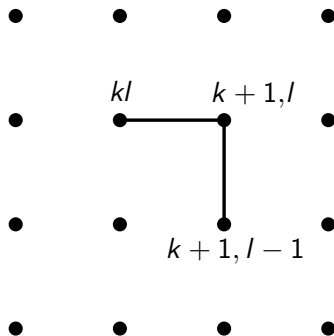
Представим $x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1}$ как вертикальное ребро, соединяющее «диполи» в узлах решётки (k, l) и $(k, l + 1)$, соответственно, а $x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}$, аналогично, как горизонтальное ребро.



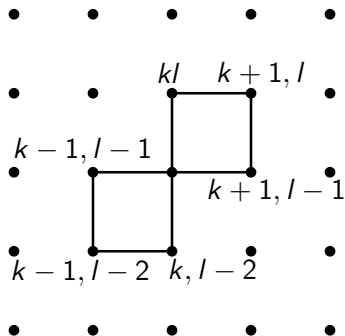
Имеем

$$\prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}).$$

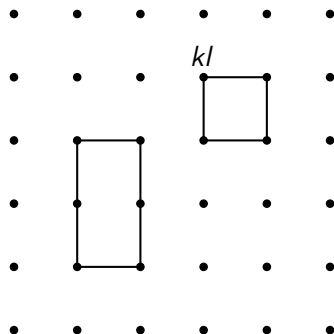
Каждому члену полинома можно однозначно поставить в соответствие совокупность рёбер, соединяющих некоторые пары соседних узлов решётки. Далее рассмотрим примеры таких соответствий.



$$x^2 \sigma_{kl} \sigma_{k+1, l}^2 \sigma_{k+1, l-1}$$



$$x^8 \sigma_{kl}^2 \sigma_{k+1,l}^2 \sigma_{k+1,l-1}^2 \sigma_{k,l-1}^4 \sigma_{k,l-2}^2 \sigma_{k-1,l-1}^2 \sigma_{k-1,l-2}^2$$



$$x^{10} \sigma_{kl}^2 \sigma_{k+1,l}^2 \sigma_{k+1,l-1}^2 \sigma_{k,l-1}^2 \sigma_{k-2,l-1}^2 \sigma_{k-1,l-2}^2 \sigma_{k-1,l-3}^2 \sigma_{k-2,l-3}^2 \sigma_{k-2,l-2}^2$$

Дадим геометрическую интерпретацию сделанным ранее замечаниям:

- $\sigma_{kl}^n \dots$, $n = 0, 2, 4 \implies$ в каждом узле графика заканчивается 0, 2 или 4 ребра (что означает замкнутость графика, самопересечения допускаются)

Дадим геометрическую интерпретацию сделанным ранее замечаниям:

- каждый член полинома даёт вклад в сумму $2^N \implies$ сумму

$$S = \sum_{(\sigma)} \prod_{k,l=1}^L (1 + x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1 + x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l})$$

можно представить в виде

$$S = 2^N \sum_r x^r g_r,$$

где g_r — число замкнутых **графиков**, составленных из (чётного) числа r связей.

Дальнейший расчёт состоит из двух этапов:

1. сумма по графикам указанного вида преобразуется в сумму по всем возможным замкнутым петлям,
2. получающаяся сумма вычисляется путём сведения к задаче о «случайных блужданиях» точки по решётке.

Окончательно, статистическая сумма будет иметь вид:

$$Z = 2^N (1 - x^2)^{-N} \times \prod_{p, q=0}^L \left[(1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) \left(\cos \frac{2\pi p}{L} + \cos \frac{2\pi q}{L} \right) \right]^{1/2}.$$

Термодинамический потенциал:

$$\Phi = -T \ln Z = -NT \ln 2 + NT \ln(1 - x^2) - \frac{1}{2} T \sum_{p, q=0}^L \ln \left[(1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) \left(\cos \frac{2\pi p}{L} + \cos \frac{2\pi q}{L} \right) \right],$$

Термодинамический потенциал:

$$\Phi = -T \ln Z = -NT \ln 2 + NT \ln(1 - x^2) - \\ - \frac{1}{2} T \sum_{p, q=0}^L \ln \left[(1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) \left(\cos \frac{2\pi p}{L} + \cos \frac{2\pi q}{L} \right) \right],$$

или, переходя от суммирования к интегрированию

$$\Phi = -NT \ln 2 + NT \ln(1 - x^2) - \\ - \frac{NT}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[(1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2)(\cos \omega_1 + \cos \omega_2) \right] d\omega_1 d\omega_2.$$

или, переходя от суммирования к интегрированию

$$\Phi = -NT \ln 2 + NT \ln(1 - x^2) - \\ - \frac{NT}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [(1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2)(\cos \omega_1 + \cos \omega_2)] d\omega_1 d\omega_2.$$

Φ имеет особую точку, когда аргумент логарифма нуль. Как функция от ω_1, ω_2 этот аргумент минимален при $\cos \omega_1 = \cos \omega_2 = 1$, когда он равен

$$(1 + x^2)^2 - 4x(1 - x^2) = (x^2 + 2x - 1)^2.$$

Это выражение имеет минимум, в котором оно обращается в нуль лишь при одном (положительном) значении $x = x_c = \sqrt{2} - 1$; соответствующая температура $T_c \left(\text{th } \frac{J}{T_c} = x_c \right)$ и является точкой фазового перехода.

Разложение $\Phi(t)$ по степеням $t = T - T_c$ вблизи точки перехода содержит наряду с регулярной частью также и особый член. Заменяя регулярную часть её значением при $t = 0$, разлагая аргумент логарифма вблизи его минимума по степеням ω_1 , ω_2 и t и производя интегрирование, получим, что вблизи точки перехода термодинамический потенциал имеет вид

$$\Phi \approx a + \frac{1}{2}b(T - T_c)^2 \ln |T - T_c|,$$

где a, b — постоянные (причём $b > 0$). Сам потенциал непрерывен в точке перехода, а теплоёмкость обращается в бесконечность по закону

$$C \approx -bT_c b \ln |T - T_c|$$

симметричному по обе стороны точки перехода.

Из непрерывности первой производной термодинамического потенциала и скачка второй, заключаем, что в данной модели имеет место фазовый переход второго рода. На качественном уровне получается, что при температурах ниже критической большая часть диполей будет ориентирована одинаково, а при температурах выше — диполей «вверх» и «вниз» будет поровну. Данная модель на качественном уровне описывает механизм ферромагнетизма (наличия намагниченности в отсутствии внешнего поля при достаточно низких температурах).

Введённая изначально для понимания природы ферромагнетизма, модель Изинга оказалась в центре разнообразных физических теорий, относящихся к критическим явлениям, жидкостям и растворам, спиновым стёклам, клеточным мембранам, моделированию иммунной системы, различным общественным явлениям и т. д. Кроме того, эта модель служит полигоном для проверки методов численного моделирования различных физических явлений.

1. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика

Спасибо за внимание!