Точное решение Онгасера двумерной модели Изинга

Вопрос по выбору на ГКЭ по физике

Драчов Ярослав

Московский физико-технический институт

21 января 2021 г.

Описание модели

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.

Характеристики конфигурации решётки

МФТИ

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.

Характеристики конфигурации решётки

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 $\theta = J/T$.

Характеристики конфигурации решётки

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

$$Z = \sum_{(\sigma)} \exp\left[\theta \sum_{k,l} (\sigma_{kl}\sigma_{kl+1} + \sigma_{kl}\sigma_{k+1l})\right] =$$

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

где $x = \operatorname{th}\theta$.

Характеристики конфигурации решётки

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

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

Интерпретация суммы S

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}.

Интерпретация суммы S

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 $\sigma_{kl}=\pm1$ 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.

Интерпретация суммы S

Имеем

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

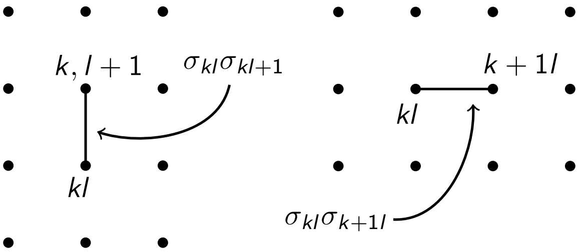
Заметим, что

- 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.

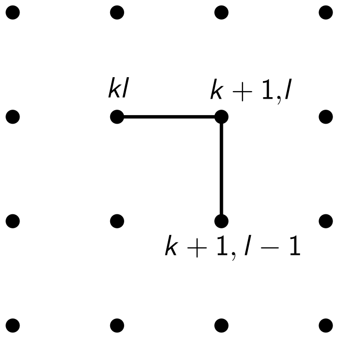


Имеем

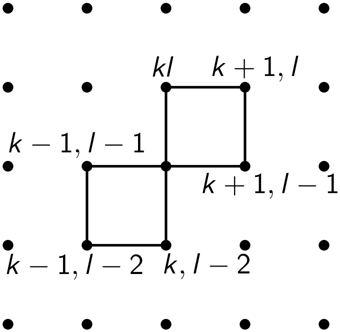
$$\prod_{k,\,l=1}^{L}(1+x\sigma_{kl}\sigma_{kl+1})(1+x\sigma_{kl}\sigma_{k+1l}).$$

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

Интерпретация суммы S

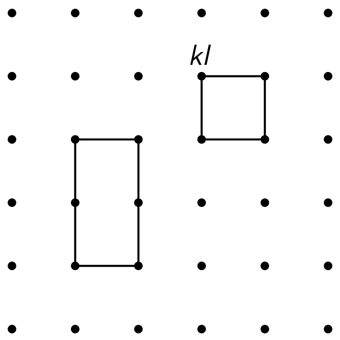


$$x^2\sigma_{kl}\sigma_{k+1,l}^2\sigma_{k+1,l-1}$$



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

Интерпретация суммы S



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

Интерпретация суммы S

Дадим геометрическую интерпретацию сделанным ранее замечаниям:

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

Интерпретация суммы S

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.

Ещё «чуть-чуть»

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:

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

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

$$\Phi = -NT\ln 2 + NT\ln(1-x^2) -$$
$$-\frac{NT}{2(2\pi)^2}\iint\limits_0^{2\pi}\ln\left[(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2)(\cos\omega_1 + \cos\omega_2)\right]d\omega_1 d\omega_2.$$

или, переходя от суммирования к интегрированию

$$\Phi = -NT\ln 2 + NT\ln(1-x^2)-$$
$$-\frac{NT}{2(2\pi)^2}\iint\limits_0^{2\pi} \ln\left[(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2)(\cos\omega_1+\cos\omega_2)\right] d\omega_1 d\omega_2.$$

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 $T_c \left(\operatorname{th}\frac{J}{T_c} = x_c\right)$ 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 произведя 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).

Приложения модели Изинга

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.

Список литературы

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

Спасибо за внимание!