Точное аналитическое решение одномерной модели Изинга. Метод трансфер-матрицы.

Contents

Автор(ы):

- Бажанов Дмитрий

В этой лекции более подробно обсудим модель Изинга, рассмотренную ранее. Чуть глубже погрузимся в физику этой модели, а также рассмотрим ее частные случае, которые имеют точные аналитические решения. Для этого также познакомимся с методом *трансфер-матрицы*.

Модель Изинга

Модель Изинга представляет собой широко распространенную математическую модель статистической физики, которая может применяться в различных областях человеческой деятельности.

Note

Несмотря на свою известность, многие не знают, что модель названа в честь Эрнеста Изинга – автора работы, опубликованной в 1925 г. [Isi25], в которой он впервые представил данную модель и которая стала его первой и по сути *единственной* публикацией.

Fig. 87 Эрнст Изинг, 1900-1998

Суть самой модели можно постичь, например, при стремлении описать свойства намагничивания материала. Представим себе, что имеется магнитная решетка (она может быть одномерной, двумерной или трехмерной) каждой вершине которой сопоставляется число называемое *спином* (σ) и принимающее значение $+1$ или -1 (соответственно поле "↑" или поле "↓"). Каждому из 2^N (где N – число вершин решетки) возможных вариантов расположения спинов (или намагниченности) приписывается энергия, величина которой определяется условиями попарного взаимодействия спинов соседних вершин. Например, энергия одномерной модели Изинга, в которой спины взаимодействуют только с ближайшими соседями (посредством параметра обменного взаимодействия J) и с однородным внешним полем (H), имеет вид:

$$E(\{\sigma\}) = -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1} - H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i. \tag{21}$$

Note

Обратите внимание, что в этой лекции используется терминология из физики (а не области квантовых вычислений, которая используется в большинстве других лекций): H – это внешнее поле, не гамильтониан, или энергия. А энергия обозначается классическим для физики E.

Это выражение соответствует периодическим граничным условиям, при которых первый и $N+1$-й спины отождествляются, то есть

$$\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1.$$

В этом случае можно считать, что система спинов находится на окружности, то есть первый и N-й спины являются ближайшими соседями и взаимодействуют между собой. Для описания такой системы необходимо найти статистическую сумму Z, в которой содержится полная информация о всех состояниях системы. Тогда другие характеристики системы, такие как удельная энергия, свободная энергия, энтропия, намагниченность, магнитная восприимчивость и др. вычисляются через статистическую сумму или ее производные.

Статистическая сумма рассматриваемой модели при температуре θ есть сумма по всем спиновым конфигурациям $\{\sigma\}$:

$$Z(\theta, H, N) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\frac{E(\{\sigma\})}{\theta}}. \tag{22}$$

Сумму по состояниям $\{\sigma\}$ можно понимать как последовательное суммирование по значениям всех переменных σ_i:

$$\sum_{\{\sigma\}} \equiv \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}.$$

Следует заметить, что количество членов статистической суммы экспоненциально растет с увеличением числа вершин, соответственно увеличивается и время расчета термодинамических параметров для большого количества частиц.

Матричный подход

Для аналитического решения модели Изинга как правило применяется матричный подход. В рамках такого подхода статистическая сумма многих решеточных моделей Изинга может быть записана в виде следа некоторой степени *трансфер-матрицы*. Чтобы выразить статистическую сумму (22) через трансфер-матрицу, сначала представим гиббсовскую экспоненту в виде произведения N множителей

(23)

$$e^{-\frac{E(\{\sigma\})}{\theta}} = T_{\sigma_1\sigma_2}T_{\sigma_2\sigma_3}\dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}T_{\sigma_N\sigma_1} = \prod_{j=1}^{N} T_{\sigma_j,\sigma_{j+1}},$$

где

$$T_{\sigma\sigma'} = \langle\sigma|T|\sigma'\rangle = e^{t\sigma\sigma' + \frac{h}{2}(\sigma+\sigma')}, \tag{24}$$

а t и h введены для более компактного написания формул и выражаются через J, H и θ следующим образом

$$t = \frac{J}{\theta}, \quad h = \frac{H}{\theta}.$$

Числа $T_{\sigma\sigma'}$ (24) будем дальше рассматривать как матричные элементы матрицы T, строки и столбцы которой вместо натуральных чисел нумеруются изинговскими переменными σ и σ'. Так как изинговские переменные принимают два значения: $\sigma, \sigma' = \pm 1$, то матрица T является квадратной матрицей размера 2×2. Договоримся дальше считать, что значение $\sigma = 1$ ($\sigma' = 1$) соответствует первой строке (первому столбцу), а значение $\sigma = -1$ ($\sigma' = -1$) соответствует второй строке (второму столбцу). Матрица T с элементами (24) в таком случае имеет следующий явный вид:

$$T = \begin{pmatrix} T_{1,1} & T_{1,-1} \\ T_{-1,1} & T_{-1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{t+h} & e^{-t} \\ e^{-t} & e^{t-h} \end{pmatrix} \tag{25}$$

Матрица T называется *трансфер-матрицей* Крамерса–Ваннье.

Равенство (23) позволяет записать статистическую сумму (22) в следующем виде

$$Z(\theta, H, N) = \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}\dots\sum_{\sigma_{N-1}=\pm1}\sum_{\sigma_N=\pm1} T_{\sigma_1\sigma_2}T_{\sigma_2\sigma_3}\dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}T_{\sigma_N\sigma_1}. \tag{26}$$

Структура слагаемых позволяет переписать сумму в правой части последнего равенства следующим образом:

$$\sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}\dots\sum_{\sigma_{N-1}=\pm1}\sum_{\sigma_N=\pm1} T_{\sigma_1\sigma_2}T_{\sigma_2\sigma_3}\dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}T_{\sigma_N\sigma_1} = \tag{27}$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}\dots\sum_{\sigma_{N-1}=\pm1} T_{\sigma_1\sigma_2}T_{\sigma_2\sigma_3}\dots T_{\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}}\sum_{\sigma_N=\pm1} T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}T_{\sigma_N\sigma_1}$$

Теперь, поскольку $T_{\sigma\sigma'}$ являются матричными элементами матрицы T, заметим, что сумма

$$\sum_{\sigma_N=\pm1} T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}T_{\sigma_N\sigma_1}$$

равна $T^2_{\sigma_{N-1}\sigma_1}$, то есть матричному элементу матрицы T^2, которая получается в результате (матричного) умножения двух матриц T (является квадратом матрицы T). Тогда сумма в правой части равенства (27) равна

$$\sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}\dots\sum_{\sigma_{N-1}} T_{\sigma_1\sigma_2}T_{\sigma_2\sigma_3}\dots T_{\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}}T^2_{\sigma_{N-1}\sigma_1}. \tag{28}$$

Дальше используем равенство

$$\sum_{\sigma_{N-1}} T_{\sigma_{N-2}\sigma_{N-1}}T^2_{\sigma_{N-1}\sigma_1} = T^3_{\sigma_{N-2}\sigma_1},$$

где $T^3 = T \cdot T^2$ – куб матрицы T, и перепишем выражение (28) в виде

$$\sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}\dots\sum_{\sigma_{N-2}} T_{\sigma_1\sigma_2}T_{\sigma_2\sigma_3}\dots T_{\sigma_{N-3}\sigma_{N-2}}T^3_{\sigma_{N-2}\sigma_1}.$$

Продолжим этот процесс и просуммируем последовательно по всем σ_i, $i = 2, \dots, N$, кроме σ_1, тогда равенство (26) преобразуется к виду

$$Z(\theta, H, N) = \sum_{\sigma_1=\pm1} T^N_{\sigma_1\sigma_1}$$

В последнем равенстве суммируются диагональные элементы матрицы T^N, которая есть матрица T в степени N. Сумма диагональных элементов матрицы – это след данной матрицы. Таким образом, окончательно получаем для статистической суммы одномерной модели Изинга с взаимодействием ближайших соседей и внешним полем, при периодических граничных условиях, следующую формулу:

$$Z(\theta, H, N) = \mathrm{Tr}\, T^N. \tag{29}$$

Отметим несколько обстоятельств, связанных с полученным выражением для статистической суммы:

1. формула (29) является следствием трансляционной инвариантности рассматриваемой системы. Трансляционная инвариантность в данном случае означает, что энергия системы спинов не изменяется при пространственном сдвиге, то есть спиновые конфигурации $\{\sigma\}$ и $\{\sigma'\}$, где $\sigma'_i = \sigma_{i+1}$, имеют одинаковые энергии;
2. представление гиббсовской экспоненты в виде произведения (23), где множители $T_{\sigma\sigma'}$ имеют вид (24), не является единственным возможным. Можно выбрать трансфер-матрицу по-другому. Например, если взять $\tilde{T}_{\sigma\sigma'} = e^{t\sigma\sigma' + h\sigma}$, то тогда: $e^{-\frac{E(\{\sigma\})}{\theta}} = \prod_{j=1}^{N} \tilde{T}_{\sigma_j \sigma_{j+1}}$. Таким образом, в выборе трансфер-матрицы существует некоторый произвол. Значение статистической суммы не зависит от этого произвола, поэтому им естественно распорядиться исходя из каких-то дополнительных соображений, например так, чтобы матрица обладала какой-то симметрией, что упрощает вычисления. Для рассмотренной выше одномерной модели Изинга трансфер-матрица была выбрана вещественной симметричной (то есть эрмитовой);
3. если выбранная нами трансфер-матрица T является эрмитовой, то с помощью унитарного преобразования U ее можно преобразовать к диагональной форме:
$$\grave{T} = U^{-1} T U = dgn\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_r\},$$

   где символом dgn обозначена диагональная матрица, на главной диагонали которой расположены ее собственные значения. В общем случае размерность такой матрицы равна величине $r = s^n$, где s – число состояний спина в вершине, а n – число обменных взаимодействий спинов цепочки (в рассматриваемой нами одномерной модели Изинга $s = 2$ и $n = 1$). В этом случае статистическая сумма (29) переписывается к следующему виду:
$$Z(\theta, H, N) = \mathrm{Tr}\, \grave{T}^N = \sum_i^r \lambda_i^N, \tag{30}$$

   При этом величина статистической суммы не меняется, поскольку след матрицы является ее инвариантом. Отметим, что процедуру диагонализации трансфер-матрицы можно провести множеством способов. В зависимости от подбора диагонализирующей матрицы U её можно провести таким образом, что на первом месте в матрице $\grave{T}$ будет стоять её главное (единственное максимальное вещественное) собственное значение, которое всегда существует по теореме Фробениуса–Перрона. Если на первое место в спектре трансфер-матрицы поставить ее главное собственное значение, то статистическую сумму (30) можно переписать как:
$$Z(\theta, H, N) = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N + \ldots + \left(\frac{\lambda_r}{\lambda_1}\right)^N\right] \tag{31}$$

   Тогда при переходе к термодинамическому пределу $(N \to \infty)$ в выражении (31) все слагаемые, кроме первого, стремятся к нулю,
$$\lim_{N\to\infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^N = 0, \\ i = 2, 3, .., r \tag{32}$$

   и выражение для статистической суммы преобразуется к виду $Z = \lambda_1^N$.
   В результате все термодинамические и магнитные функции системы – свободная энергия системы, приходящаяся на один спин,

$$F = -\frac{\theta}{N}\ln Z = -\theta \ln\lambda_1, \tag{33}$$

энтропия

$$S = -\frac{\partial F}{\partial \theta} = \ln\lambda_1 + \frac{\theta}{\lambda_1}\frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta}, \tag{34}$$

теплоемкость

$$C = -\theta\frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} = 2\frac{\theta}{\lambda_1}\frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta} + \frac{\theta^2}{\lambda_1}\frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \theta^2} - \frac{\theta^2}{\lambda_1^2}\left(\frac{\partial \lambda_1}{\partial \theta}\right)^2, \tag{35}$$

намагниченность

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = \frac{\theta}{\lambda_1}\frac{\partial \lambda_1}{\partial H}, \tag{36}$$

и магнитная восприимчивость

$$\chi = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \frac{\partial M}{\partial H} = -\frac{\theta}{\lambda_1^2}\left(\frac{\partial \lambda_1}{\partial H}\right)^2 + \frac{\theta}{\lambda_1}\frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial H^2} \tag{37}$$

определяются только через главное собственное значение трансфер-матрицы.

Решение одномерной модели

Теперь вернемся к аналитическому решению рассматриваемой нами классической одномерной модели Изинга ($s = 2$ и $n = 1$). Как показали выше, задача сводится к сведению трансфер-матрицы (25) диагональному виду. Для этого воспользуемся правилами линейной алгебры и решим характеристическое уравнение для трансфер-матрицы и найдем её собственные значения:

$$det\,(T - \lambda I) = det\left(T - \lambda\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right)\right) = 0, \tag{38}$$

где I – единичная матрица, λ – действительная переменная. Раскрывая определитель (38), находим искомое характеристическое уравнение:

$$\lambda^2 - \lambda\left(e^{t+h} + e^{t-h}\right) + e^{2t} - e^{-2t} = 0 \tag{39}$$

решением которого являются два собственных значения:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}e^t\left(e^h + e^{-h}\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{e^{2t}(e^h + e^{-h})^2 - 4e^{2t} + 4e^{-2t}} = e^t\cosh(h) \pm \sqrt{e^{2t}\sinh} \tag{40}$$

где $\cosh(h) = \frac{e^h + e^{-h}}{2}$ – гиперболический косинус и $\sinh(h) = \frac{e^h - e^{-h}}{2}$ – гиперболический синус. Следовательно статистическая сумма рассматриваемой модели записывается в следующем виде:

$$Z = TrT^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N.$$

Здесь следует отметить, что для всех физических значений параметров t и h ($\in \mathbb{R}, < \infty$) выполняется условие: $|\lambda_+| > |\lambda_-|$. Тогда в термодинамическом пределе ($N \to \infty$) значение λ_+ преобладает над λ_- и удовлетворяет (32), а статистическая сумма преобразуется к виду: $Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N \sim \lambda_+^N$. Отсюда можно получить выражение для удельной свободной энергии системы, приходящейся на один спин (33) (с точностью до множителя $(-\theta)$):

$$f(t,h) = \lim_{N\to\infty}\frac{\ln Z}{N} = \ln\lambda_+ = t + \ln\left(\cosh(h) + \sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4t}}\right)$$

и для намагниченности (36):

$$m = -\frac{\partial f(t,h)}{\partial h} = \frac{\cosh(h) + \frac{\sinh(h)\cosh(h)}{\sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4t}}}}{\cosh(h) + \sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4t}}} = \frac{\sinh(h)}{\sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4t}}},$$

которая является аналитической функцией h и исчезает при $h \to 0$ (так как $\sinh(h) \to 0$). Таким образом рассматриваемая модель не допускает фазового перехода при любой положительной температуре ($\theta > 0$). Она претерпевает *парамагнитный-ферромагнитный* фазовый переход только при $\theta = 0$, в этом случае спонтанная намагниченность равна $|m| = 1$.

Заключение

В этой лекции ознакомились с аналитическим решением одномерной модели Изинга методом *трансфер-матрицы*. В заключении хотелось бы сказать, что модель Изинга поддается многим обобщениям, будь то более высокие измерения, различные решетки или модифицированные взаимодействия.