Димерные модели в статистической механике

Н. Решетихин

Равновесная статистическая механика

- X – конечное множество, пространство состояний физической системы. Может быть пространством с мерой, не обязательно конечномерным.
- На состояниях системы задана функция энергии $E : X \to \mathbb{R}$ которая приписывает состоянию $x \in X$, его энергию $E(x)$.
- В равновесном состоянии с температурой T

состояния распределены по вероятностному закону, распределение Больцмана:

$$\mathrm{Prob}(x) \propto \exp\left(-\frac{E(x)}{kT}\right)$$

Это эмпирический закон, k = постоянная Больцмана, T - температура в ед. Кельвина.

Нормирующий коэффициент в этом распределении это статсумма системы:

$$Z = \sum_{x \in X} \exp\left(-\frac{E(x)}{kT}\right)$$

Для вероятностного распределения Больцмана получаем:

$$\mathrm{Prob}(x) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E(x)}{kT}\right)$$

$$\sum_{x \in X} \mathrm{Prob}(x) = 1$$

Специальные случаи:

• $T \to \infty$, высокая температура

$$\mathrm{Prob}(x) = \frac{1}{|X|}, \quad Z \to |X|$$

равномерное распределение

• $T \to 0$, $E_0 = \min\limits_{x \in X} (E(x))$

$X_0 = \{x \in X \mid E(x) = E_0\}$

E_0 : основное состояние

X_0 = пространство основных состояний

$$\mathrm{Prob}(x) \to \begin{cases} 0, & x \notin X_0 \\ \frac{1}{|X_0|}, & x \in X_0 \end{cases}, \quad Z \to |X_0| e^{-\frac{E_0}{kT}}$$

равномерное распределение на пространстве основных состояний. Если $X_0 = \{x_0\}$, то x_0 называется основным состоянием. $T \to 0$ система замораживается на x_0

<u>Наблюдаемое</u> = функция на X,

т.е. функции от случайной переменной

$x \in X$, которые мы можем наблюдать.

Среднее значение наблюдаемой f (мат. ожидание f):

$$\mathbb{E}(f) = \sum_{x \in X} f(x) \, \mathrm{Prob}(x)$$

В физических обозначениях:

$$\mathbb{E}(f) = \langle f \rangle = \sum_{x} \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(x)}{kT}} f(x),$$

Для конечного множества X вычисление средних и стат. суммы Z это, обычно, задачи из алгебраической комбинаторики.

В физике, обычно, интересны большие системы (поэтому и статистическая механика)

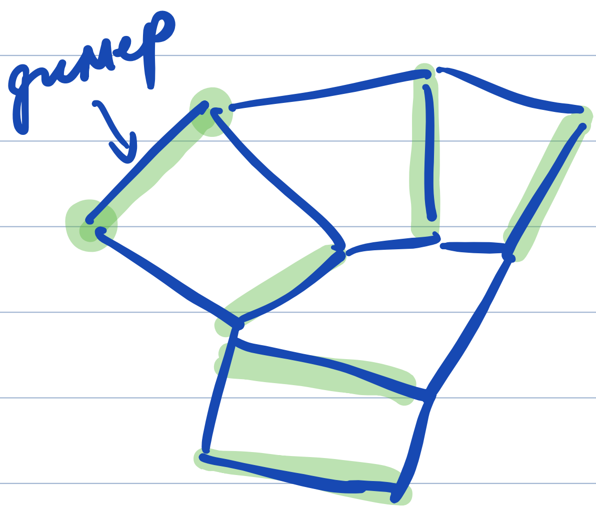
С этой точки зрения наиболее интересна задача "вычисления" (описания) предела "$X \to \infty$".

Димерные модели

Γ - конечный граф, $V(\Gamma)$ - множество вершин, $E(\Gamma)$ - множество рёбер Γ.

$|V| > 1$.

Определение. Димерная конфигурация на графе Γ это perfect matching на множестве вершин Γ соединённых рёбрами.



каждая вершина Γ соединена димером с какой-то другой вершиной (только одной)

- каждая вершина явл. границей димера
- димеры никогда не соединяются вершинами

Энергия ребра: $E: E(\Gamma) \to \mathbb{R}$

$e \mapsto E(e)$, $E(e)$ = энергия ребра $e \in E(\Gamma)$

Энергия димерного состояния:

$$E(D) \overset{def}{=} \sum_{e \in D} E(e)$$

Больцмановское распределение

$$\mathrm{Prob}(D) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E(D)}{kT}\right) =$$

$$= \frac{1}{Z} \prod_{e \in D} w(e)$$

$$w(e) = \exp\left(-\frac{E(e)}{kT}\right) > 0$$

Статсумма:

$$Z = \sum_{D \subset \Gamma} \prod_{e \in D} w(e)$$

Локальные корреляционные функции

$$G_{e_1 \dots e_n} = \mathrm{Prob}(e_i \subset D)$$

Условные вероятности того что рёбра $e_1, \dots, e_n$ заняты димерами. Их можно записать как мат ожидание.

$$\sigma_e(D) = \begin{cases} 1, & e \in D \\ 0, & e \notin D \end{cases}$$ характерист. функция ребра

$$G_{e_1 \dots e_n} = \mathbb{E}(\sigma_{e_1} \cdots \sigma_{e_n}) =$$

$$= \sum_D \mathrm{Prob}(D)\, \sigma_{e_1}(D) \cdots \sigma_{e_n}(D)$$

Локальные корреляционные функции показывают насколько случайная переменная D коррелирует между рёбрами e_i? Например, она декорелирована между рёбрами e_1, e_2 если

$$G_{e_1 e_2} = G_{e_1} G_{e_2}$$

Утверждение

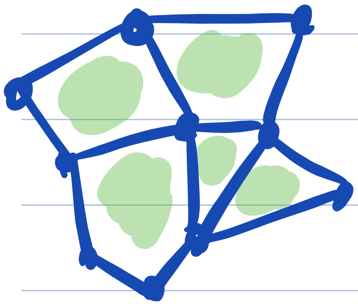
$$\langle \sigma_{e_1} \cdots \sigma_{e_n} \rangle = \prod_{i=1}^{n} w(e_i) \quad \frac{\partial^n \ln(Z)}{\partial w(e_1) \cdots \partial w(e_n)}$$

Док-во: упражнение

Важное заключение: для конечных графов, если мы знаем статсумму как функцию $\{w(e)\}_{e \in E(\Gamma)}$, мы знаем все корр. функции.

Плоские графы и их дуальные

Рассмотрим граф вложенный в $\mathbb{R}^2$, $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$, предположим что он конечный, связный. Такой граф определяет клеточный комплекс X_Γ.

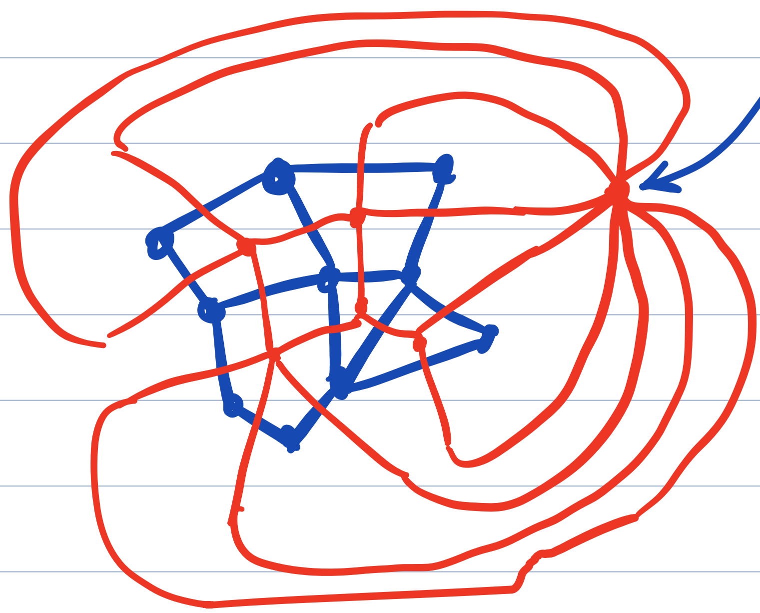


$\Gamma \subset X_\Gamma$ $\begin{cases} \bullet\ V(X_\Gamma) \text{ 0-клетки = вершины} \\ \bullet\ E(X_\Gamma) \text{ 1-клетки = рёбра} \end{cases}$

вложение $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ $\{ \bullet\ F(X_\Gamma)$ 2-клетки = фэйсы

Двойственный (дуальный) клеточный комплекс $X_\Gamma^\vee$

outer vertex of $X^\vee$

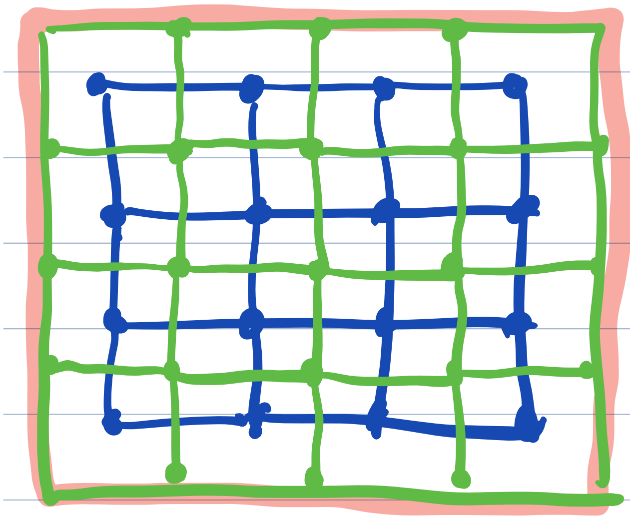
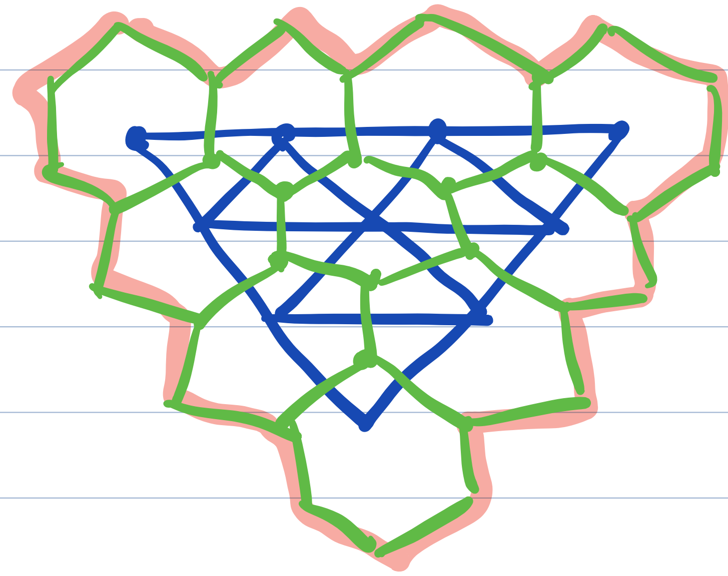


$V(X^\vee) \Leftrightarrow F(X)$

$E(X^\vee) \Leftrightarrow E(X)$

$F(X^\vee) \Leftrightarrow V(X)$

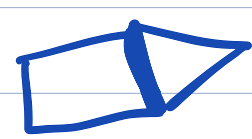
В физике Γ обычно это область в кристаллической решётке. В этом случае $\Gamma^\vee$ это двойственная область в двойственной решётке

Биекция между димерами на Γ и двойными клетками на $\Gamma^\vee$

$\Gamma \subset \mathbb{R}^2$, X_Γ, $X_{\Gamma^\vee}$ двойственные клеточные комплексы. ($\Gamma \subset X_\Gamma$, $\Gamma^\vee \subset X_\Gamma^\vee$), клетка $\equiv$ 2-клетка

Определение. Двойная клетка на $\Gamma^\vee$ это объединение двух клеток $\Gamma^\vee$ у которых есть общее ребро



Биекция между димерами на Γ и двойными клетками на $\Gamma^\vee$

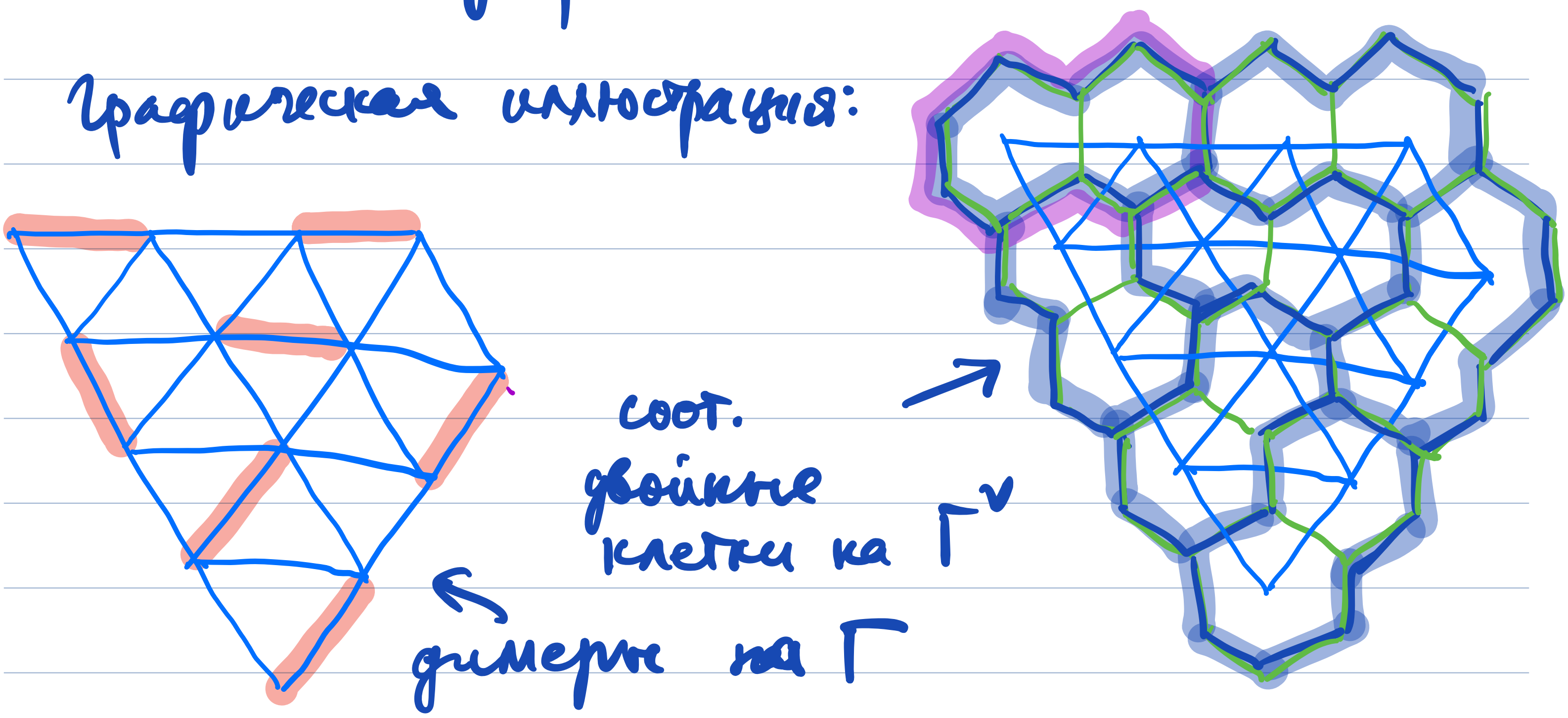
димер на Γ

соответствующая двойная клетка на $X_\Gamma^\vee$

<u>Теорема</u>. Это биективное соответствие

<u>Док-во</u>. д. р.

Графическая иллюстрация:



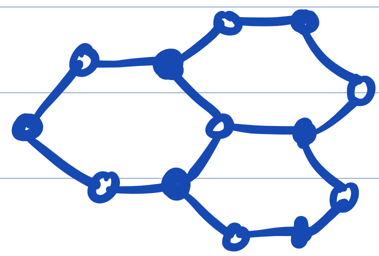
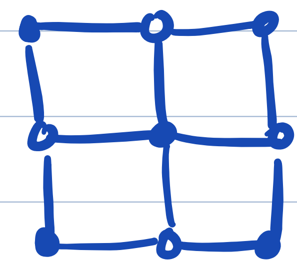
соот. двойные клетки на $\Gamma^\vee$

димеры на Γ

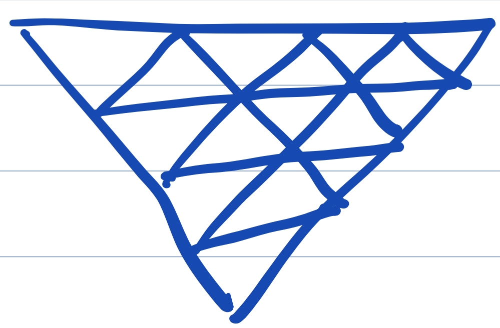
Двудольные плоские графы

Опр. Граф Г двудолен, если вершины можно разделить на две подгруппы ($V(\Gamma) = B \sqcup W$) так что рёбра соединяют вершины B только с вершинами W и наоборот.

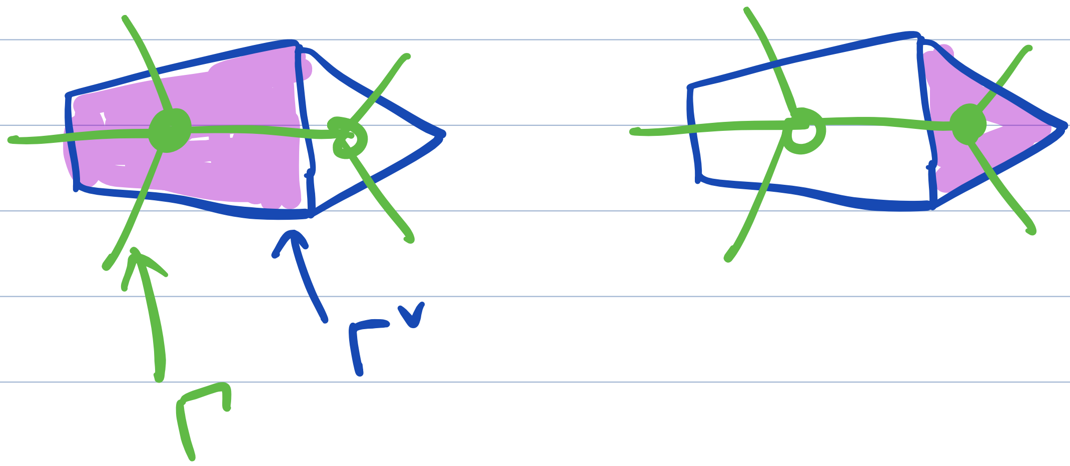
т.е. нет B–B и W–W рёбер, только B–W.

Примеры:  , 

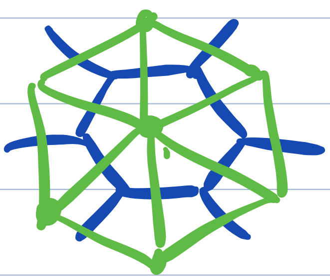
Непример: Треугольная решётка



Для двудольных графов двойственные двойные клетки имеют дополнительную структуру, окрас:

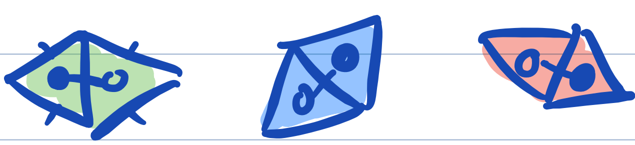


<u>Димеры на 6-угольной двудольной решётке</u>

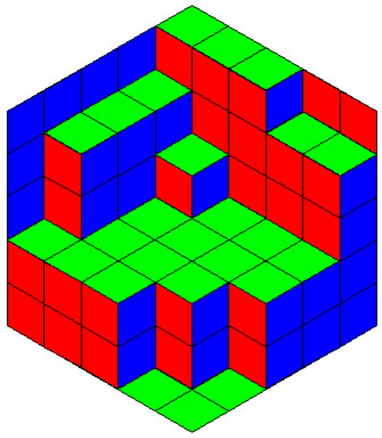


Шестиугольная решётка и её двойственная треугольная решётка.

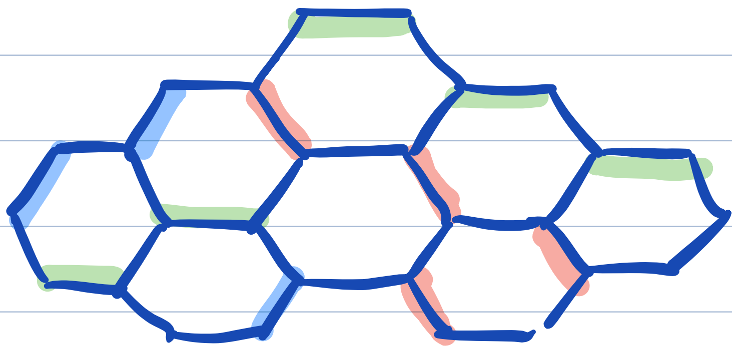
Двойные клетки на треугольной решётке



Три возможных типа

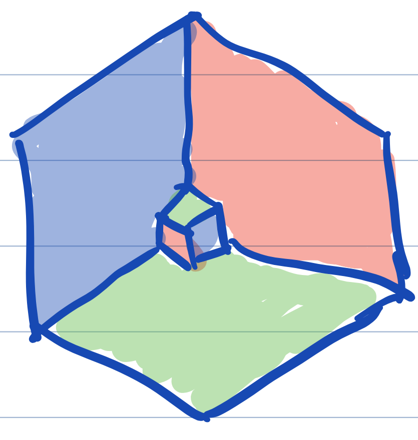


Замощение шестиугольника ромбами (двойными клетками) двойственное димерной конфигурации на соответствующей области шестиугольной решётки



Трёхмерная интерпретация:

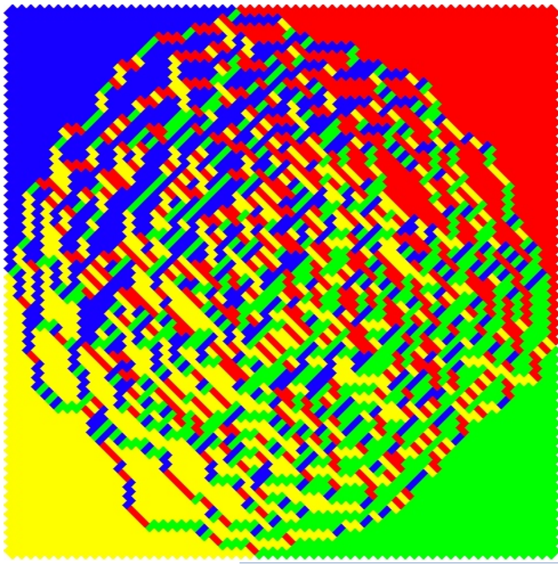
кубики в углу комнаты.



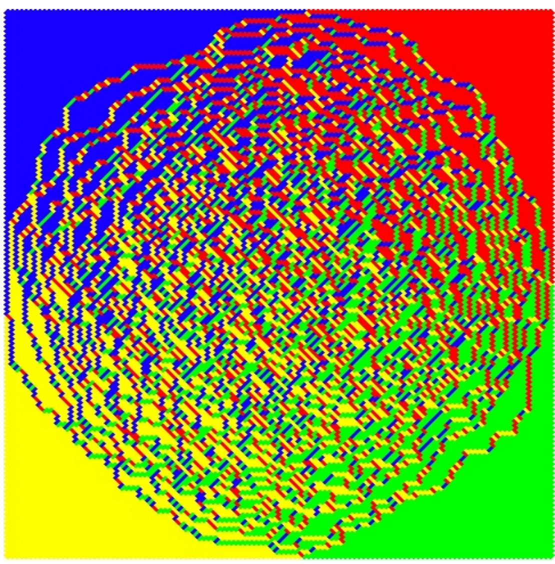
Предел $N \to \infty$

N – линейный размер области.

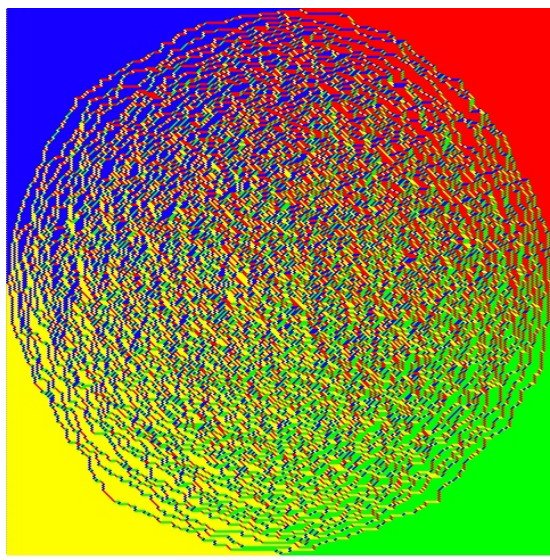
Пример:



80×80



120×120



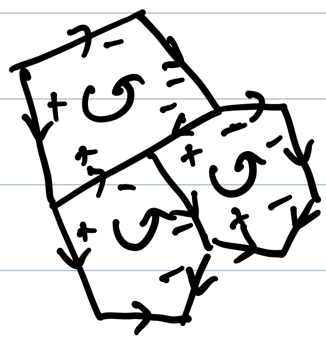
280×280

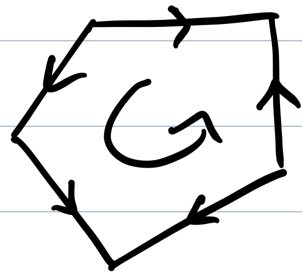
Как эти картинки были сделаны?

Решение Кастеляйна (Kasteleyn)

Оказывается статсумму димерной модели можно записать как пфаффиан $|V|\times|V|$ матрицы, где $|V|$ = число вершин.

① Ориентация Кастеляйна плоского графа





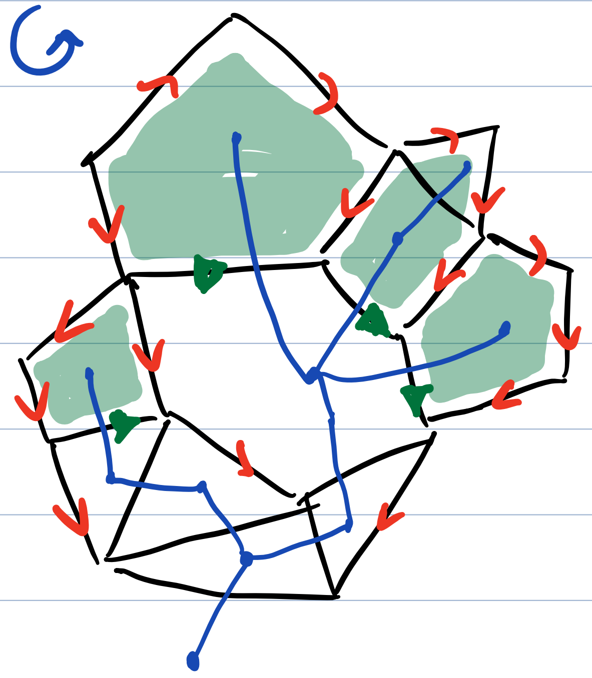
$$\prod_{e\in\partial f} \varepsilon(e,f) = -1$$

Предложение Ориентации Кастеляйна существуют.

Д-во (конструктивное)

. Выберем spanning tree T для $\Gamma^\vee \subset X^\vee_\Gamma$

. Ориентируем рёбра Γ не пересекающиеся с T произвольным образом (красная)

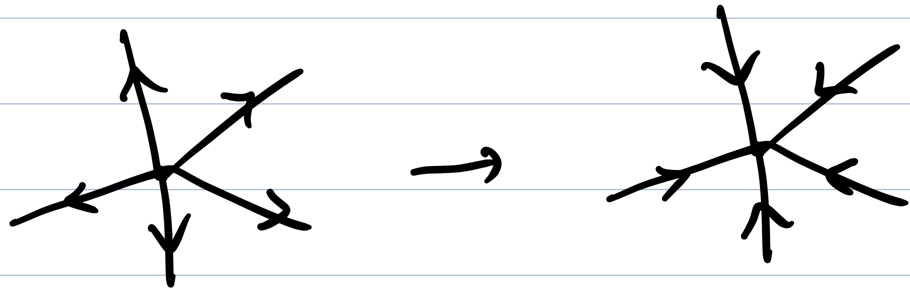


• ориентируем рёбра Г пересекающие крайние ветки T так чтобы фэйсы содержащие крайние вершины T были K-ориентированы (зелёные)

• убираем ориентированные фэйсы и продолжаем по индукции.

Мы построили много K-ориентаций. Они параметризуются изначальной (красной) ориентацией части рёбер.

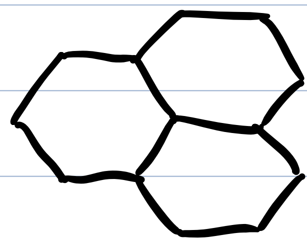
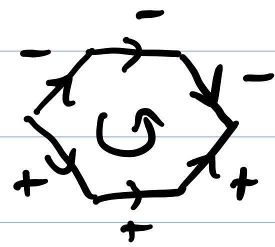
<u>Определение</u> Две K-ориентации K и K' эквивалентны, если K' можно получить из K последовательностью движений образующих ориентацию рёбер вокруг верш.

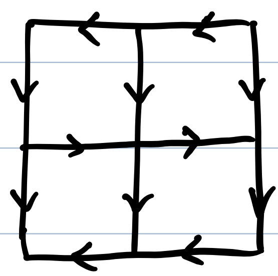


Теорема. Все K-ориентации плоского графа эквивалентны.

Док-во Домашка.

Примеры

1)  

2) 

② Матрица Kasteleyna

$$A^K_{ij} = \begin{cases} w(ij), & i \bullet\!\longrightarrow\!\bullet\, j \\ -w(ij), & i \bullet\!\longleftarrow\!\bullet\, j \\ 0, & \text{not connected} \end{cases} \qquad i,j \in V(\Gamma)$$

$$w(ij) = w(ji) = w(e),$$

димерный вес

$$w(e) = \exp\left(-\frac{E(e)}{kT}\right)$$

Теорема (Кастелейн)

$$|Pf(A^K)| = \sum_{D \subset \Gamma} \prod_{e \in D} w(e)$$

(и правая часть не зависит от K)

Pfaffians

Определение: $A^t = -A$, $n \times n$, n-even

$$Pf(A) = \frac{1}{2^{n/2} \left(\frac{n}{2}\right)!} \sum_{\sigma \in S_n} (-1)^\sigma A_{\sigma_1 \sigma_2} \cdots A_{\sigma_{n-1} \sigma_n}$$

- $Pf(A)^2 = Det(A) > 0$

Следствие Если собственные значения

$A: \ i\lambda_1, -i\lambda_2, \dots, i\lambda_{\frac{n}{2}}, -i\lambda_{\frac{n}{2}}, \lambda_i > 0$

т.к. любая $n \times n$ матрица $A^t = -A$, n-чёт

$$A \sim \begin{bmatrix} 0 & -i\lambda_1 & & & & \\ i\lambda_1 & 0 & & & 0 & \\ & & \ddots & & & \\ & 0 & & & 0 & -i\lambda_{\frac{n}{2}} \\ & & & & i\lambda_{\frac{n}{2}} & 0 \end{bmatrix}$$

То $$\mathrm{Det}(A) = \prod_{i=1}^{n/2} \lambda_i^2$$

а $$\mathrm{Pff}(A) = \prod_{i=1}^{n/2} \lambda_i$$

Формула

$$Z = |\mathrm{Pf}(A^K)|$$

позволяет вычислять Z & корр. функ явно в пределе "$\Gamma \to \infty$".