ЧАСТЬ 3
ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

1. Основные определения

Рассмотрим двумерную квадратную решетку, образованную пересечением m горизонтальных и n вертикальных прямых. Полное число узлов в решетке обозначим через N. Обычно мы будем рассматривать случай $m = n$, поэтому $N = n^2$. Каждый узел задается вектором $x = (x_1, x_2)$. Будем считать, что в каждом узле x расположена частица. Состояние частицы в узле x определяется величиной σ_x, называемой *спином*, которая может принимать два значения ± 1. Спины тогда можно представлять себе как стрелочки, торчащие перпендикулярно плоскости решетки, соответственно вверх или вниз. Таким образом, на решетке задана функция σ_x. Так введенная модель носит название *двумерной модели Изинга*.

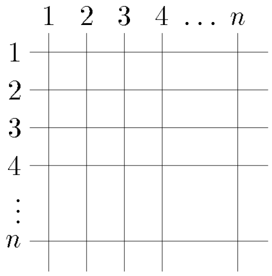

Рис. 3.1.

Совокупность значений всех N спинов решетки σ назовем *конфигурацией* или *состоянием* системы. Поскольку каждый спин может принимать два значения, и все спины не зависят друг от друга, мы, таким образом, получаем 2^N различных конфигураций.

Энергией состояния σ назовем функционал

$$E(\sigma) = -J \sum_{(x,y)} \sigma_x \sigma_y - H \sum_x \sigma_x. \qquad (3.1)$$

В первом слагаемом суммирование ведется по всем парам соседних узлов (x, y), во втором — по всем узлам решетки x. J, H — некоторые параметры.

В 1901 году Гиббсом было получено так называемое *каноническое распределение* (его также часто называют *распределением*

Гиббса), играющее важнейшую роль в статистической физике. Суть его заключается в том, что статистическое распределение любого макроскопического тела, являющегося сравнительно малой частью некоторой большой замкнутой системы, определяется выражением

$$w_n = A \exp\left(-\frac{E_n}{T}\right), \tag{3.2}$$

где w_n есть вероятность того, что система находится в состоянии n, E_n — энергия этого состояния, T — абсолютная температура. Мы видим, что вероятность уменьшается с ростом E_n. Поэтому система большую часть времени проводит в состоянии с наименьшей энергией.

В частности, если J и H в выражении (3.1) положительны, модель Изинга описывает идеализированную физическую систему — двумерный ферромагнетик. Решетка модели соответствует кристаллической решетке магнетика, спины изображают магнитные моменты атомов кристалла. Параметрам J и H можно придать физический смысл: H — это напряженность внешнего магнитного поля, перпендикулярного плоскости решетки, J характеризует обменное взаимодействие магнитных моментов. В основном состоянии все спины направлены в одну сторону, что приводит к возникновению ненулевого магнитного момента всего кристалла.

Используя математический аппарат статфизики, можно, как говорят, решить модель Изинга, то есть найти связи между макроскопическими величинами, характеризующими систему, такими как температура, теплоемкость, полный магнитный момент.

Величина

$$Z_N = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} = \sum_{\sigma} \exp\left(K \sum_{(x,y)} \sigma_x \sigma_y + h \sum_{x} \sigma_x\right), \tag{3.3}$$

где $K = J/T$, $h = H/T$, называется *статистической суммой* (или *статсуммой*). Здесь суммирование ведется по всем возможным состояниям системы.

Через Z_N выражаются все термодинамические функции. В частности, *свободная энергия* определяется следующим образом:

$$F_N = -T \ln Z_N.$$

Весом состояния σ называется величина (3.2), в которой нормировочная постоянная A положена равной Z_N^{-1}:

$$W(\sigma) = Z_N^{-1} e^{-E(\sigma)/T}.$$

Сумма весов по всем состояниям равна 1.

Для любой функции состояния $X(\sigma)$ можно определить ее *среднее* (математическое ожидание), взяв сумму с весами по всем состояниям:

$$\langle X(\sigma)\rangle = \sum_{\sigma} X(\sigma) W(\sigma).$$

Важные примеры средних:

а) Средняя энергия $U = \langle E(\sigma)\rangle$.
б) Намагниченность $m_N = \langle M(\sigma)\rangle/N$, где $M(\sigma) = \sum_x \sigma_x$.

Имеет место следующее тождество для средней энергии:

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{F}{T}\right).$$

Среднее вида $\langle \sigma_{x_1}\sigma_{x_2}\ldots\sigma_{x_M}\rangle$ называется *M-точечной корреляционной функцией.*

Термодинамический предел

Из интуитивных соображений в физике делается вывод о существовании так называемых *термодинамических пределов*. Рассматриваются решетки все бóльших размеров и осуществляется предельный переход при $N \to \infty$:

$$\varepsilon = \lim_{N\to\infty} \frac{\langle E(\sigma)\rangle}{N}, \quad f = \lim_{N\to\infty} \frac{F}{N}, \quad m = \lim_{N\to\infty} m_N.$$

При этом считается, что большая решетка получается из меньшей как бы наращиванием узлов по краям меньшей, а термодинамические пределы не зависят от того, как именно происходит это наращивание. В частности, предел будет тем же, если мы рассмотрим вместо квадратной решетки $n \times n$ решетку $n_1 \times n_2$, где n_1 и n_2 стремятся к бесконечности независимо друг от друга.

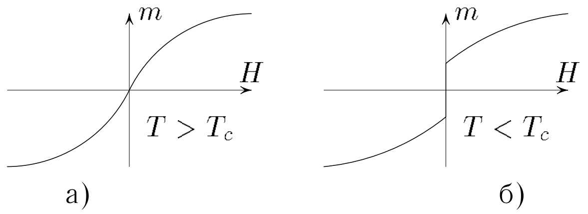

Рис. 3.2.

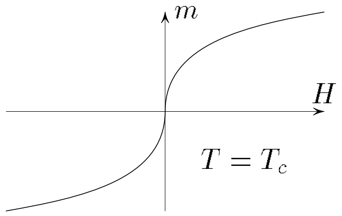

Рис. 3.3.

Например, предполагается существование термодинамического предела корреляционных функций $\langle \sigma_{x_1}\sigma_{x_2}...\sigma_{x_M}\rangle$, и этот предел зависит только от взаимного расположения узлов решетки $x_1, \ldots, x_M$. На самом деле такая ситуация осуществляется, если в системе нет дальнего порядка. В общем случае в зависимости от граничных условий могут существовать разные термодинамические пределы.

Для ферромагнетиков характерно явление *спонтанной намагниченности*. При достаточно высокой температуре T зависимость намагниченности m от внешнего магнитного поля H такова, что при уменьшении H до нуля m также падает до нуля (рис. 3.2а). Если же температура меньше некоторой критической температуры $T < T_c$, то даже в отсутствие магнитного поля ($H = 0$) намагниченность отлична от нуля (рис. 3.2б). Ее величина и называется спонтанной намагниченностью m_0, а критическая температура T_c называется *температурой Кюри*.

В точке $T = T_c$ в отсутствие магнитного поля намагниченность m равна нулю, однако, производная $\chi = \partial m/\partial H$ (восприимчивость), обращаясь в бесконечность, терпит в этой точке разрыв (рис. 3.3).

На рис. 3.4 показана зависимость спонтанной намагниченности от температуры. В точке $T = T_c$ имеет место фазовый переход второго рода, который и будет главным предметом нашего изучения. Он харак-

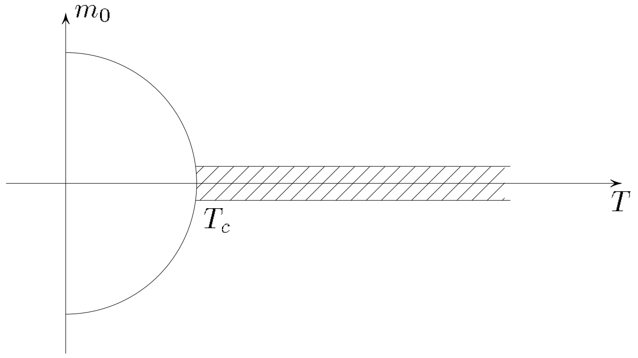

Рис. 3.4.

теризуется тем, что термодинамические функции либо их производные как функции H и T имеют особенности (обращаются в бесконечность) в точке фазового перехода ($T = T_c,\ H = 0$).

Возникает естественный вопрос: «Может ли статистическая физика объяснить эти сингулярности?»

Если взять большое, но конечное N, никаких сингулярностей в модели Изинга не возникает, поскольку все функции, определенные нами, являются аналитическими. Сингулярности появляются при переходе к термодинамическому пределу.

В одномерной модели, решенной Изингом в 1925 году расходимости отсутствуют даже после предельного перехода. Это обстоятельство вызывало сомнения в том, что решеточные модели смогут объяснить существование критической точки.

Только в 1944 году, после блестящего решения Онсагером двумерной модели Изинга, стало ясным, что решеточные модели действительно являются мощнейшим средством изучения фазовых переходов второго рода. Однако не будем забегать вперед и рассмотрим сейчас одномерную модель, поскольку в процессе ее решения мы введем ряд понятий, играющих важнейшую роль во всем дальнейшем изложении.

Одномерная модель Изинга

В одномире решетка модели представляет из себя цепочку, содержащую $N = n$ узлов. Будем считать, что первый и последний узлы — соседние. Такие граничные условия называются тороидальными. Узел i характеризуется спином σ_i ($\sigma_i = \pm 1$; см. рис. 3.5).

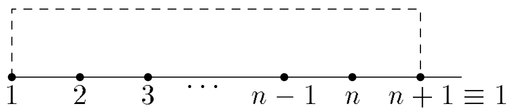

Рис. 3.5.

Статистическая сумма имеет вид

$$Z_N = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} ... \sum_{\sigma_N} \exp\left(K \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_{i=1}^{N} \sigma_i\right),$$

или

$$Z_N = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} ... \sum_{\sigma_N} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) ... T(\sigma_N, \sigma_1),$$

где

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp\left(K \sigma_i \sigma_{i+1} + h \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2}\right)$$

(такая запись удобна симметрией $T(\sigma, \sigma') = T(\sigma', \sigma)$). Матрица T называется трансфер-матрицей.

$T(\sigma, \sigma')$ удобно записать в виде симметрической матрицы 2×2:

$$T = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}.$$

Легко заметить, что в этих обозначениях статсумма дается выражением

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, T^N.$$

При замене $T \to XVX^{-1}$ значение следа $\mathrm{Tr}\, T^N$ не изменится. Можно привести T к диагональному виду $T = \mathrm{diag}\{\lambda_1, \lambda_2\}, \lambda_1 > \lambda_2$, подобрав подходящую матрицу X.

Получаем, что

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, T^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right).$$

При переходе к термодинамическому пределу второе слагаемое в скобках стремится к нулю, и мы получаем

$$Z_N = \lambda_1^N.$$

Вычисляя собственные значения, видим, что

$$\lambda_1 = e^K \operatorname{ch} h + (e^{2K} \operatorname{sh}^2 h + e^{-2K})^{1/2}.$$

Отсюда следует, что статсумма Z_N, свободная энергия, а также намагниченность являются аналитическими функциями H и T. Таким образом, система не имеет фазового перехода при положительных температурах.

Низкотемпературное и высокотемпературное разложения

Вернемся к двумерной модели. С этого момента будем считать, что магнитное поле отсутствует, то есть $h = 0$. Тогда статсумма (3.3) сводится к

$$Z = \sum_{\sigma} \exp\left(K \sum_{(x,y)} \sigma_x \sigma_y\right). \tag{3.4}$$

Кроме того, будем накладывать тороидальные граничные условия, то есть отождествлять узлы, принадлежащие противоположным границам.

Центры граней нашей решетки $\mathcal{L}$ образуют новую решетку $\mathcal{L}^*$ (рис. 3.6), называемую дуальной решеткой.

Пусть M — число всех соседних пар, то есть количество ребер в решетке $\mathcal{L}$. Тогда $M = 2N - n - m$ в случае незамкнутой решетки и $M = 2N$ в случае тороидальных граничных условий.

Преобразуем статсумму следующим образом:

$$Z = \sum_{\sigma} e^{K \sum [(\sigma_x \sigma_y - 1) + 1]} = e^{KM} \sum_{\sigma} e^{K \sum (\sigma_x \sigma_y - 1)}.$$

Состояния системы можно упорядочить естественным образом.

1) Существуют два состояния, в которых все спины направлены в одну сторону. Для них все $\sigma_x \sigma_y = 1$ и, следовательно,

$$X(\sigma) := e^{K \sum (\sigma_x \sigma_y - 1)} = 1.$$

2) Существуют состояния, в которых один какой-то спин направлен в одну сторону, а остальные — в противоположную. Число таких

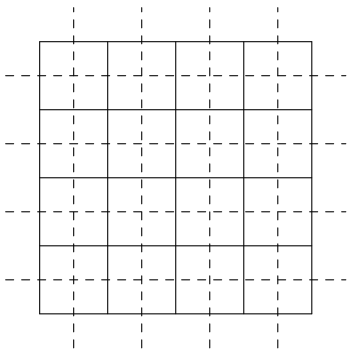

Рис. 3.6. Сплошной линией показана решетка $\mathcal{L}$, пунктирной — дуальная решетка $\mathcal{L}^*$.

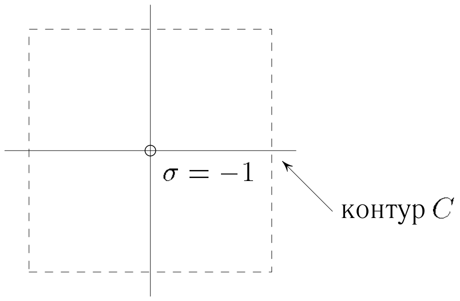

Рис. 3.7.

состояний равно N. Для таких состояний $X(\sigma) = (e^{-2K})^4$. Поставим в соответствие каждому такому состоянию замкнутый контур C на дуальной решетке вокруг того узла, в котором расположен перевернутый спин (рис. 3.7). Легко видеть, что $X(\sigma) = \kappa^{l(C)}$, где $l(C)$ — длина контура, а $\kappa = e^{-2K}$.

3) Существуют состояния с двумя перевернутыми спинами. И в этом случае можно поставить в соответствие состоянию контур на дуальной решетке. Здесь имеются две возможности (см. рис. 3.8). И так далее.

Заметим, что произвольному замкнутому (не обязательно связанному) контуру C на дуальной решетке $\mathcal{L}^*$ отвечают две конфигурации σ, причем

$$X(\sigma) = \kappa^{l(C)}.$$

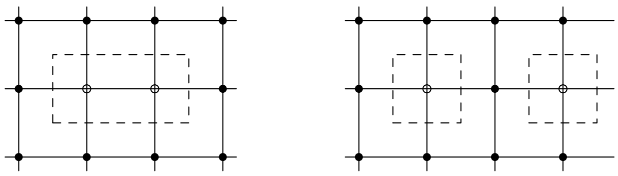

Рис. 3.8.

Еще раз подчеркнем, что мы понимает под словом «контур» не обязательно связанный контур. Важно только то, что он должен быть замкнутым.

Таким образом,

$$Z = e^{MK} \sum_C \left(e^{-2K}\right)^{l(C)},$$

где C — замкнутые контуры на дуальной решетке, а $\kappa = e^{-2K}$.

Такое разложение статсуммы называется низкотемпературным, поскольку оно хорошо сходится при малых T ($K = J/T \gg 1$).

Другое представление для статистической суммы (3.4) можно получить, воспользовавшись разложением сомножителя, отвечающего одному ребру решетки $\mathcal{L}$

$$e^{K\sigma_x\sigma_y} = \operatorname{ch} K + \sigma_x\sigma_y \operatorname{sh} K = \operatorname{ch} K(1 + \sigma_x\sigma_y \operatorname{th} K).$$

Тогда

$$Z = (\operatorname{ch} K)^M \sum_\sigma \prod_{(x,y)} (1 + \sigma_x\sigma_y \operatorname{th} K).$$

Каждый член в этой сумме может быть представлен графически следующим образом: проводим линию вдоль ребра (x, y), если из соответствующего множителя выбирается слагаемое $\sigma_x\sigma_y \operatorname{th} K$. Если же выбирается 1, то линия не проводится. Выполнив эту операцию для всех ребер, получим контур, но теперь уже не на дуальной, а на самой решетке $\mathcal{L}$.

Разложим произведение по степеням $\operatorname{th} K$:

$$\prod_{(x,y)} (1 + \sigma_x\sigma_y \operatorname{th} K) = 1 + a_1 \operatorname{th} K + a_2 \overset{2}{\operatorname{th}} K + \ldots + a_M \overset{M}{\operatorname{th}} K.$$

Коэффициент a_1 есть сумма по всем ребрам (x,y) решетки (контурам длины 1) произведений $\sigma_x\sigma_y$ (произведений спинов на концах контура). Аналогично, коэффициент a_i есть сумма по всем контурам длины i на решетке $\mathcal{L}$ (не обязательно связным) произведений спинов на концах контура (для замкнутых контуров в сумму входит 1, вне зависимости от того, какая рассматривается конфигурация).

При суммировании коэффициентов a_i по всем конфигурациям сократятся слагаемые, отвечающие незамкнутым контурам.

Получим

$$Z = (\operatorname{ch} K)^M 2^N \sum_C (\operatorname{th} K)^{l(C)} = (\operatorname{ch} K)^M 2^N \sum_C \kappa^{l(C)},$$

где сумма берется по всем замкнутым контурам на $\mathcal{L}$, а $\kappa = \operatorname{th} K$. Такое разложение называется *высокотемпературным*, поскольку оно хорошо сходится при больших T $(K = J/T \ll 1)$.

Дуальность Крамерса-Ванье

Пусть ψ — свободная энергия на один узел решетки, то есть

$$-\psi = \lim_{N\to\infty} \frac{\ln Z_N}{N}$$

(ψ является функцией K). Суммы $\sum_C \kappa^{l(C)}$ в высокотемпературном и низкотемпературном разложениях похожи, но в одном случае сумма берется по всем замкнутым контурам на решетке $\mathcal{L}$, а в другом — по всем замкнутым контурам на дуальной ей решетке $\mathcal{L}^*$. Для квадратных решеток конечного размера $\mathcal{L}$ и $\mathcal{L}^*$ различаются на границе. При переходе к термодинамическому пределу, когда обе решетки становятся бесконечными, этим различием можно пренебречь. В этом пределе $M/N \to 2$. Поэтому сравнивая два разложения, получим:

$$-\psi(K) = 2K + \Phi(e^{-2K}) = \ln(2\operatorname{ch}^2 K) + \Phi(\operatorname{th} K), \tag{3.5}$$

где

$$\Phi(\kappa) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln\left(\sum_C \kappa^{l(C)}\right).$$

Равенство (3.5) называется *соотношением дуальности*.

Определим переменную K^* соотношением

$$\operatorname{th} K^* = e^{-2K}. \tag{3.6}$$

У соотношения (3.6) есть более симметричная форма, которая ясно показывает симметрию этого соотношения относительно замены K на K^* и наоборот:

$$\operatorname{sh} 2K^* \operatorname{sh} 2K = 1. \tag{3.7}$$

В дальнейшем мы всегда будем считать, что величины K и K^* связаны соотношением (3.7). Теперь можно исключить Φ из (3.5) и написать соотношение, связывающее свободные энергии при высокой и низкой температуре (если K велико, то K^* мало):

$$\psi(K^*) = \psi(K) + 2K - \ln(2\operatorname{ch}^2 K^*). \tag{3.8}$$

В критической точке свободная энергия является неаналитической функцией T, а следовательно, и K. Допустим, что при $K = K_c$ имеется критическая точка, но тогда при $K^* = K_c$ ψ также будет неаналитична. Если мы предположим, что существует лишь одна критическая точка, то $K = K^*$. Из (3.8) получаем уравнение для критической точки:

$$2K = \ln(2\operatorname{ch}^2 K),$$

которое тоже можно переписать в симметричной форме:

$$\operatorname{sh}^2 2K_c = 1.$$

2. Модель Изинга

Решение Вдовиченко

В настоящее время не существует ни одного решения двумерной модели Изинга с магнитным полем, отличным от нуля. Тем не менее, эта модель содержит важные предпосылки, оправдывающие ее использование в качестве модели магнетика, а именно ненулевые короткодействующие взаимодействия и наличие критической точки.

В этом разделе мы приводим решение двумерной модели Изинга в отсутствие магнитного поля, принадлежащее Вдовиченко. Из существующих решений оно, по-видимому, наиболее простое. Суть его