Журнал экспериментальной и теоретической физики

Т. 55 *1968* *Вып. 5(11)*

К ТЕОРИИ МОДЕЛИ ИЗИНГА

О. К. Калашников, Е. С. Фрадкин

Методом спектральных плотностей получена система уравнений для корреляционных функций модели Изинга произвольной размерности во внешнем поле. Рассмотрено решение полученных уравнений для одномерной модели Изинга и найдено явное выражение для всех корреляционных функций и термодинамических характеристик системы.

1. Введение

Моделью Изинга называют систему взаимодействующих локализованных диполей (спинов), каждый из которых взаимодействует только с ближайшими соседями и с внешним магнитным полем. Гамильтониан модели имеет вид

$$H = -J \sum_{(i)} S^z_{(i)} + g \sum_{(i);(j)} S^z_{(i)} V_{(i);(j)} S^z_{(j)}, \tag{1.1}$$

где J — внешнее поле, g — константа связи, $S^z_{(i)}$ — z-компонента оператора спина, локализованного в (i) узле, (i) — собирательный индекс. Потенциал взаимодействия определен как

$$V_{(i);(j)} = \sum_{m=0}^{t} \delta_{i_1, j_1} \cdots \frac{1}{2} (\delta_{i_m, j_m+1} + \delta_{j_m, i_m+1}) \cdots \delta_{i_t, j_t}, \tag{1.2}$$

где t — мерность решетки. Вводя обычным образом операторы ферми-поля $\overset{+}{a}_{(i)}$ и $a_{(i)}$ и сопоставляя

$$S^z_{(i)} = n_{(i)} - {}^1/_2, \quad n_{(i)} = \overset{+}{a}_{(i)} a_{(i)}, \tag{1.3}$$

перепишем гамильтониан системы (см. (1.1)) в терминах новых операторов. После несложных преобразований находим следующее выражение:

$$H = C + \sum_{(i)} \varepsilon n_{(i)} + g \sum_{(i);(j)} n_{(i)} V_{(i);(j)} n_{(j)}, \tag{1.4}$$

где мы обозначили

$$C = \frac{N^t}{2}\left(J + t\frac{g}{2}\right), \quad \varepsilon = -(J + tg). \tag{1.5}$$

Таким образом, задача сводится к нахождению корреляционных функций и термодинамических характеристик системы, гамильтониан которой имеет вид (1.4). Начиная с известной работы Онсагера [1], наиболее полное исследование этой задачи проведено в двухмерном случае в отсутствии внешнего поля. Однако основные методы исследования, как матричный, так и комбинаторный (см. например, [2]), в той или иной форме сводят задачу нахождения термодинамического потенциала двухмерной модели Изинга к решению задачи с другим (квадратичным) гамильтонианом, но дающим тот же термодинамический потенциал, и поэтому мало приспособлены для нахождения корреляционных функций. Более того, указанные методы не удается обобщить на случай двухмерной модели Изинга во внешнем поле и в трехмерном случае даже при отсутствии внешнего поля. Далее, с помощью обычного метода температурных функций Грина пока не удалось получить точное решение даже в одномерной модели Изинга. Это обусловлено главным образом тем, что для решения задачи в рамках этого метода наряду с одновременными корреляционными функциями необходимо рассматривать также многовременные корреляционные функции.

Настоящая работа посвящена систематическому изучению модели Изинга с помощью метода спектральных плотностей [3]. В этом методе приходится иметь дело только с одновременными корреляционными функциями, что значительно упрощает решение поставленной задачи. В этой статье получена система уравнений для корреляционных функций модели Изинга произвольной размерности, и здесь мы ограничимся точным решением этой системы в простейшем случае одномерной модели Изинга. При этом получено выражение как для термодинамического потенциала, так и для всех корреляционных функций во внешнем поле.

2. Термодинамические характеристики системы

Свойства системы удобно исследовать с помощью первой спектральной плотности, определенной обычным образом:

$$\Lambda_{(i)}(\tau) = \langle [\overset{+}{a}_{(i)}; a_{(i)}(\tau)]_+ \rangle. \tag{2.1}$$

Так как оператор $n_{(i)}$ коммутирует с H, то уравнение движения для оператора $a_{(i)}(\tau)$ легко интегрируется, а потому для спектральной плотности можно записать следующее выражение:

$$\Lambda_{(i)}(\tau) = \left\langle \exp\left\{-i\left(\varepsilon + 2g\sum_{(j)} V_{(i);\,(j)} n_{(j)}\right)\tau\right\}\right\rangle. \tag{2.2}$$

Используя определения $V_{(i);\,(j)}$ (см. (1.2)), можно записать бесконечную систему моментов для $\Lambda_{(i)}(\tau)$ в виде одного рекуррентного соотношения

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}(\omega-\varepsilon)^\nu \Lambda_{(i)}(\omega) = g^\nu \sum_{m=0}^{2t} m^\nu d_{(i)}\big|_m^{2t}, \quad \nu = 0, 1\ldots, \tag{2.3}$$

где мы определили

$$d_{(i)}\big|_m^{2t} = \sum_{p=m}^{2t} (-1)^{m+p}\binom{p}{m}\langle \Pi_p^{2t}(i)\rangle; \quad \binom{p}{m} = \frac{p!}{m!\,(p-m)!} \tag{2.4}$$

и $\Pi_p{}^{2t}(i)$ — сумма всевозможных сочетаний (операторов плотности числа частиц) $2t$ ближайших соседей узла (i) по p. Спектральная плотность, удовлетворяющая всей бесконечной системе моментов, имеет вид

$$\Lambda_{(i)}(\omega) = \sum_{m=0}^{2t} d_{(i)}\big|_m^{2t}\, 2\pi\delta(\omega - \varepsilon - mg). \tag{2.5}$$

В силу трансляционной инвариантности $d_{(i)}|_m{}^{2t}$ очевидно не зависят от номера узла (i), и если эти величины известны, то первая спектральная плотность полностью определена, а тогда исследование термодинамических характеристик системы не представляет труда. Например, средние числа заполнения и термодинамический потенциал системы соответственно равны:

$$\bar{n} = \sum_{m=0}^{2t} \frac{d_m{}^{2t}}{1+\exp[\beta(\varepsilon+mg)]};$$

$$\frac{\Omega-\Omega_0}{N^t} = t\frac{g}{4} + \frac{1}{2}\int_0^g dg_1 \sum_{m=0}^{2t} \frac{d_m{}^{2t}(m-2t)}{1+\exp[\beta(\varepsilon+mg_1)]}, \tag{2.6}$$

где Ω_0 — термодинамический потенциал системы при $g=0$, обычно легко вычисляемая величина.

3. Система уравнений для корреляционных функций

Для изучения корреляционных функций необходимо рассмотреть μ-частичную спектральную плотность, определенную следующим образом:

$$A_{(i_\mu)\ldots(i_1)}(\tau) = \langle [n_{i_\mu}\ldots n_{(i_2)} a^{+}_{(i_1)};\, a_{(i_1)}(\tau)]_+\rangle, \tag{3.1}$$

причем для дальнейшего существенно, чтобы $(i_1) \neq \{(i_\mu)\ldots(i_2)\}$. Аналогично первой спектральной плотности бесконечную систему моментов для спектральной функции (3.1) можно записать в виде одного рекуррентного соотношения:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}(\omega-\varepsilon)^\nu A_{(i_\mu)\ldots(i_1)}(\omega) = g^\nu \sum_{m=0}^{2t} m^\nu d_{(i_\mu)\ldots(i_1)}\big|_m^{2t}. \tag{3.2}$$

Непосредственной проверкой убеждаемся, что решением системы (3.2) является спектральная плотность вида

$$A_{(i_\mu)\ldots(i_1)}(\omega) = \sum_{m=0}^{2t} d_{(i_\mu)\ldots(i_1)}\big|_m^{2t} 2\pi\delta(\omega-\varepsilon-mg), \tag{3.3}$$

где $d_{(i_\mu)\ldots(i_1)}\big|_m{}^{2t}$ являются естественным обобщением выражения (2.4) и равны

$$d_{(i_\mu)\ldots(i_1)}\big|_m^{2t} = \sum_{p=m}^{2t} (-1)^{m+p}\binom{p}{m}\langle n_{(i_\mu)}\ldots n_{(i_2)}\Pi_p^{2t}(i_1)\rangle. \tag{3.4}$$

Теперь, используя спектральные свойства функции (3.1), определим μ-частичную корреляционную функцию выражением

$$W_{(i_\mu)\ldots(i_1)} \equiv \langle n_{(i_\mu)}\cdots n_{(i_1)}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\,\frac{A_{(i_\mu)\ldots(i_1)}(\omega)}{1+\exp(\beta\omega)}. \tag{3.5}$$

На основании явного вида, для высшей спектральной плотности (см. (3.3)), интеграл в правой части уравнения (3.5) можно вычислить, и мы получаем систему уравнений для корреляционных функций

$$W_{(i_\mu)\ldots(i_1)} = \sum_{m=0}^{2t} \frac{d_{(i_\mu)\ldots(i_1)}\big|_m^{2t}}{1+\exp[\beta(\varepsilon+mg)]}. \tag{3.6}$$

В этой статье мы ограничимся подробным решением полученной системы уравнений в одномерном случае.

4. Одномерная модель Изинга

Теперь получим полное решение одномерной модели Изинга, т. е. определим термодинамические свойства и все корреляционные функции системы. Для определения последних выпишем в явном виде уравнение (3.6). Так как модель одномерна ($l = 1$) с топологией в виде замкнутого кольца, то число ближайших соседей равно двум, а собирательный индекс (i) — есть обычный индекс. Тогда для коэффициентов $d_{(i_\mu)\dots(i_1)}|_{m^2}$ (см. определение (3.4)) легко выписать явное выражение:

$$\begin{gathered}
d_{i_\mu\dots i_1}|_{0^2} = W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1-1,\, i_1+1} + W_{i_\mu\dots i_2} - \\
-(W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1-1} + W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1+1}), \\
d_{i_\mu\dots i_1}|_{1^2} = (W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1-1} + W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1+1}) - 2W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1-1,\, i_1+1}, \\
d_{i_\mu\dots i_1}|_{2^2} = W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1-1,\, i_1+1}.
\end{gathered} \tag{4.1}$$

Подставляя явный вид коэффициентов $d_{i_\mu\dots i_1}|_{m^2}$ в уравнение (3.6), после несложных преобразований получаем систему уравнений для корреляционных функций в явном виде:

$$W_{i_\mu\dots i_1} + s(W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1-1} + W_{i_\mu\dots i_2,\, i_1+1}) = \frac{W_{i_\mu\dots i_2}}{1+\exp(\beta\varepsilon)} + rW_{i_\mu\dots i_2,\, i_1-1,\, i_1+1}, \tag{4.2}$$

где s и r — известные функции, имеющие вид

$$\begin{gathered}
s = \left(\frac{1}{1+\exp(\beta\varepsilon)} - \frac{1}{1+\exp[\beta(\varepsilon+g)]}\right); \\
r = \left(\frac{1}{1+\exp(\beta\varepsilon)} - \frac{2}{1+\exp[\beta(\varepsilon+g)]} + \frac{1}{1+\exp[\beta(\varepsilon+2g)]}\right).
\end{gathered} \tag{4.3}$$

Заметим, что уравнение (4.2) справедливо, если $i_1 \neq (i_\mu \dots i_2)$ и является основным уравнением для одномерной модели Изинга.

Если внешнее поле выключено, т. е. $J = 0$, то $r = 0$ (в чем легко убедиться, используя явный вид (4.3) и обозначения (1.5)). Тогда система уравнений (4.2) упрощается и распадается на замкнутые уравнения вида

$$W_0|_{i_\mu\dots i_1} + s_0(W_0|_{i_\mu\dots i_2,\, i_1-1} + W_0|_{i_\mu\dots i_2,\, i_1+1}) = \frac{W_0|i_\mu\dots i_2}{1+\exp(-\beta g)}, \tag{4.4}$$

где s_0 — значение s при $J = 0$ и везде в дальнейшем нулем внизу будем отмечать величины при выключенном внешнем поле. Далее, не снижая общности, можно считать, что $i_\mu > i_{\mu-1} > \dots > i_1$, так как операторы плотности числа частиц (см. (3.5)) коммутируют, причем в дальнейшем это условие существенно. В силу трансляционной инвариантности корреляционная функция зависит только от разности индексов, т. е. $W_0|_{i_\mu\dots i_1} = W_0(\gamma_{\mu-1}\dots\gamma_1)$, где $\gamma_e = i_{e+1} - i_e$, и не представляет труда убедиться, что решение, имеющее правильное поведение при $N \to \infty$, имеет вид

$$W_0(\gamma_{\mu-1}\dots\gamma_1) = \bar{n}_0\sigma_0(\gamma_{\mu-1})\dots\sigma_0(\gamma_1), \tag{4.5}$$

т. е. в пределе $N \to \infty$ μ — частичная корреляционная функция представима мультипликативным образом, где

$$\sigma_0(\gamma) = \frac{1}{2}\left[1 + (-1)^\gamma\left(\operatorname{th}\frac{\beta g}{4}\right)^\gamma\right]. \tag{4.6}$$

Перейдем к рассмотрению случая $J \neq 0$. Тогда $r \neq 0$ и необходимо решать полную систему уравнений (4.2). В случае $N \to \infty$ можно показать, что корреляционные функции по-прежнему сохраняют мультипликативный вид (4.5) и при этом для $\sigma(\gamma)$ получаем уравнение вида

$$\sigma(\gamma) + s(\sigma(\gamma-1) + \sigma(\gamma+1)) = [1 + \exp(\beta\varepsilon)]^{-1} + r\sigma(\gamma-1)\sigma(2), \tag{4.7}$$

причем $\sigma(\gamma)$ должна удовлетворять следующим граничным условиям: $\sigma(0) = 1$, $\sigma(\gamma)|_{\gamma\to\infty} = \mathrm{const} < \infty$. Решение уравнения (4.7) следует искать в виде

$$\sigma(\gamma) = hx^\gamma + \varkappa.$$

Тогда для $h, x, \varkappa$ получаем систему уравнений

$$h + \varkappa = 1, \quad x + s(x^2 + 1) = r(hx^2 + \varkappa),$$
$$\varkappa(1 + 2s) - r\varkappa(hx^2 + \varkappa) = [1 + \exp(\beta\varepsilon)]^{-1}. \tag{4.8}$$

Перейдем к новым переменным $\varkappa = {}^1/_2(1 + R)$ и $h = {}^1/_2(1 - R)$ и сделаем дробно-линейное преобразование вида

$$\left(R - \operatorname{th}\frac{\beta J}{2}\right)\Big/\left(R + \operatorname{th}\frac{\beta J}{2}\right) = x. \tag{4.9}$$

Тогда первое уравнение системы (4.8) переписывается в виде

$$\frac{R - \operatorname{th}(\beta J/2)}{R + \operatorname{th}(\beta J/2)} + \left[s - \frac{r}{2}(1-R)\right]\left(\frac{R - \operatorname{th}(\beta J/2)}{R + \operatorname{th}(\beta J/2)}\right)^2 + \left[s - \frac{r}{2}(1+R)\right] = 0. \tag{4.10}$$

После несложных преобразований находим, что относительно R это вырожденное квадратичное уравнение, которое легко решается:

$$R^2 = \operatorname{sh}^2\frac{\beta J}{2}\Big/\left[\operatorname{sh}^2\frac{\beta J}{2} + \exp(\beta g)\right]. \tag{4.11}$$

При решении (4.10) мы использовали определение функций s и r (см. (4.3)). Непосредственной подстановкой убеждаемся, что второе уравнение системы (4.8) выполняется тождественно, причем

$$x = \frac{\operatorname{ch}(\beta J/2) - \sqrt{\operatorname{sh}^2(\beta J/2) + \exp(\beta g)}}{\operatorname{ch}(\beta J/2) + \sqrt{\operatorname{sh}^2(\beta J/2) + \exp(\beta g)}}, \quad R = \frac{\operatorname{sh}(\beta J/2)}{\sqrt{\operatorname{sh}^2(\beta J/2) + \exp(\beta g)}}. \tag{4.12}$$

Таким образом, функция $\sigma(\gamma)$ полностью определена, а тогда, согласно (4.5), мы располагаем выражением для всех корреляционных функций системы при $J \neq 0$ и $N \to \infty$.

5. Термодинамические характеристики системы

Согласно формулам (2.6), для определения всех термодинамических свойств системы достаточно знать d_m^{2t}. Согласно (2.4), в случае одномерной модели Изинга, имеем

$$d_0^2 = 1 + W(2) - 2\bar{n}, \quad d_1^2 = 2(\bar{n} - W(2)), \quad d_2^2 = W(2), \tag{5.1}$$

т. е. мы видим, что все термодинамические характеристики системы определяются единственной корреляционной функцией $W(2)$.

Вычислим теперь средние числа заполнения. Используя явный вид d_m^2, после несложных преобразований находим из (2.6), что

$$\bar{n} = \frac{1}{(1 + 2s)[1 + \exp(\beta\varepsilon)]} + \frac{r}{1 + 2s}W(2), \tag{5.2}$$

где r и s — функции, определенные ранее (см. (4.3)). Сравнивая это выражение со вторым выражением системы (4.8) и учитывая, что $W(2) = \bar{n}(hx^2+\varkappa)$, находим, что $\bar{n} = \varkappa = {}^1/_2(1+R)$. Определяя далее намагниченность на один спин выражением

$$\frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle S_i^z\rangle,$$

легко убеждаемся, используя (1.3), что определенная ранее величина R есть намагниченность системы. Ввиду важности, приводим еще раз ее явный вид

$$R = \frac{\operatorname{sh}(\beta J/2)}{\sqrt{\operatorname{sh}^2(\beta J/2)+\exp(\beta g)}}. \tag{5.3}$$

Таким образом мы видим, что при выключенном внешнем поле $J=0$, намагниченность системы исчезает, т. е. одномерная решетка Изинга не испытывает спонтанной намагниченности.

Далее представляет интерес вычислить термодинамический потенциал, что в данном случае есть просто свободная энергия. Используя формулы (2.6) и (5.1), после несложных преобразований находим

$$\frac{F-F_0}{N} = \frac{g}{4} - \int_0^g dg_1\left(\frac{1+W(2)-2\bar{n}}{1+\exp(\beta\varepsilon)} + \frac{\bar{n}-W(2)}{1+\exp[\beta(\varepsilon+g_1)]}\right). \tag{5.4}$$

Теперь, подставляя явное выражение для средних чисел заполнения $\bar{n} = {}^1/_2(1+R)$, где R приводится в (5.3), и выражение для двухчастичной корреляционной функции

$$W(2) = \frac{\left[\operatorname{sh}\frac{\beta J}{2} + \sqrt{\operatorname{sh}^2\frac{\beta J}{2}+\exp(\beta g)}\right][\exp(\beta J)+\exp(\beta g)]}{2\sqrt{\operatorname{sh}^2\frac{\beta J}{2}+\exp(\beta g)}\left[\operatorname{ch}\frac{\beta J}{2}+\sqrt{\operatorname{sh}^2\frac{\beta J}{2}+\exp(\beta g)}\right]^2}, \tag{5.5}$$

после несложных вычислений выражение (5.4) преобразуется к виду

$$\frac{F-F_0}{N} = \frac{g}{4} - \int_0^g \frac{dg_1\exp(\beta g_1)}{2\sqrt{\operatorname{sh}^2(\beta J/2)+\exp(\beta g_1)}\,[\operatorname{ch}(\beta J/2)+\sqrt{\operatorname{sh}^2(\beta J/2)+\exp(\beta g_1)}]}. \tag{5.6}$$

Интеграл (5.6) и F_0 (свободная энергия при $g=0$) вычисляются элементарно, и окончательно получаем известный результат:

$$\frac{F}{N} = \frac{g}{4} - \frac{1}{\beta}\ln\left[\operatorname{ch}\frac{\beta J}{2}+\sqrt{\operatorname{sh}^2\frac{\beta J}{2}+\exp(\beta g)}\right]. \tag{5.7}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ

Интересной иллюстрацией эффективности полученных соотношений для корреляционных функций (5.6) может служить то обстоятельство, что с их помощью удается получить, в частности, дифференциальное уравнение непосредственно для статсуммы. Так, например, в случае одномерной модели Изинга во внешнем поле, для получения этого уравнения необходимо использовать выражение для средних чисел заполнения (см. (5.2)) и выражение для ближайшей двухчастичной корреляционной функции, которое легко получается непосредственно из уравнения (4.2) и имеет вид

$$W(1) = \bar{n}[1 + \exp(-\beta J)]^{-1} + (r - s) W(2). \tag{П.1}$$

Далее, используя определение статсуммы, находим, что справедливы следующие формулы:

$$\bar{n} = \frac{\partial}{\partial(\beta J)}\left(\frac{\ln Z}{N}\right) + \frac{1}{2},$$

$$W(1) = -\frac{\partial}{\partial(\beta g)}\left(\frac{\ln Z}{N}\right) + \frac{\partial}{\partial(\beta J)}\left(\frac{\ln Z}{N}\right) + \frac{1}{4}. \tag{П.2}$$

Теперь, исключая из уравнений (5.2) и (П.1) двухчастичную корреляционную функцию $W(2)$ и используя формулы (П.2), получаем уравнение

$$\operatorname{cth}\frac{\beta J}{2}\frac{\partial}{\partial(\beta J)}\left(\frac{\ln Z}{N}\right) + [1 - \exp(-\beta g)]\frac{\partial}{\partial(\beta g)}\left(\frac{\ln Z}{N}\right) = $$
$$= \frac{1}{4}[1 + \exp(-\beta g)]. \tag{П.3}$$

Таким образом, статсумма одномерной модели Изинга, как функция двух переменных удовлетворяет квазилинейному дифференциальному уравнению в частных производных первого порядка. Полученное уравнение дает возможность восстановить вид статсуммы по известному граничному значению при выключенном внешнем поле или при выключенном взаимодействии. Так, в частности, по выражению при выключенном внешнем поле, т. е.

$$\left(\frac{\ln Z}{N}\right)_{\beta J=0} = -\frac{\beta g}{4} + \ln\left[1 + \exp\left(\frac{\beta g}{2}\right)\right], \tag{П.4}$$

легко получить из уравнения (П.3) следующий известный вид для статсуммы во внешнем поле:

$$\frac{\ln Z}{N} = -\frac{\beta g}{4} + \ln\left[\operatorname{ch}\frac{\beta J}{2} + \sqrt{\operatorname{sh}^2\frac{\beta J}{2} + \exp(\beta g)}\right]. \tag{П.5}$$

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
30 апреля 1968 г.

Литература

[1] L. Onsager. Phys. Rev., 65, 117, 1944.

[2] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика, Изд. Наука, 1964, стр. 527. G. F. Newell, E. W. Montroll. Rev. Mod. Phys., 25, 353, 1953. E. W. Montroll, R. B. Potts, J. S. Ward. J. Math. Phys., 4, 308, 1963. H. Green, C. Hurst. Order-disorder phenomena, London Interscience, 1964. M. Fisher. Prog. in Phys., 30, Part. II, 1967, стр. 615.

[3] О. К. Калашников, Е. С. Фрадкин. ЖЭТФ, 55, 607, 1968.

THEORY OF THE ISING MODEL

O. K. Kalashnikov, E. S. Fradkin

An equation set for the correlation functions of the Ising model of arbitrary dimensions in an external field is derived by the spectral density method. A solution of the equations for a one-dimensional Ising model is considered and an explicit expression for all correlation functions and thermodynamic characteristics of the system is determined.