сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-85-927

В.Н.Плечко

МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ДВУМЕРНЫХ ИЗИНГОВСКИХ СИСТЕМАХ

1985

I. Модель Изинга является одной из самых известных модельных систем статистической механики и вряд ли нуждается в специальных комментариях. В качестве введения в задачу ограничимся указанием классической работы Онсагера /1/ и обзоров /2-5/. Современное состояние теории точно решаемых модельных систем изинговского типа в трансфер-матричной формулировке отражено в книге Бакстера /6/. Недавние обсуждения различных аспектов модели Изинга см., например, в трудах конференций /7-9/.

В данном сообщении обсуждаются новые методы вычислений в двумерных изинговских системах более сложных, чем модель на стандартной прямоугольной решетке. Задача решается через построение представления для статистической суммы в виде интеграла по грассмановым переменным; такие интегралы можно трактовать как функциональные интегралы по фермионным числам /10/. Интеграл для статистической суммы оказывается гауссовского типа в случае решаемых моделей /11-16/.

Грассмановы интегралы в модели Изинга применялись рядом авторов, начиная с первых работ Березина /11/ и Фрадкина /12/; в последнее время такие методы обсуждались в связи с проблемами теории поля /13/. Дальнейшие ссылки и обсуждение см., например, в /15,16/ и в обзоре /9/; к этому списку следует еще добавить оригинальные работы Бугрия /14/, где в задаче применялись два коммутирующих класса грассмановских переменных.

Во всех работах этого направления обсуждался простейший вариант модели - задача на прямоугольной решетке. Здесь мы рассмотрим вычисление статистической суммы (свободной энергии) для класса задач, включающего модель Изинга на прямоугольной, треугольной и гексагональной решетках /17,18/. Кратко обсуждается также схема решения моделей типа свободных фермионов Фана - Ву /19,20/ и грассманизация (или фермионизация) моделей бакстеровского типа /6/ (в последнем случае получаются негауссовские интегралы). Основное внимание уделяется рационализации техники расчетов.

Совершенствование и упрощение методов вычислений представляет большой интерес в связи с рядом важных нерешенных задач в теории изинговских систем.

Применяемый здесь подход является модифицированным вариантом метода /15,16/, в который вносится одновременно ряд обобщений и упрощений. В частности, при рассмотрении обобщенных моделей, как оказывается, удобно факторизовать не элементарные больцмановские веса /I5,I6/, а спиновые полиномы, соответствующие комплексам таких весов. Это позволяет существенно уменьшить число грассмановых переменных в интеграле для статистической суммы, причем сам интеграл оказывается одним и тем же для всех типов решеток (см. ниже (8) и (24)).

В качестве введения в метод см. /I5/, дальнейшие комментарии приводятся по ходу изложения.

При изучении обобщенных изинговских задач можно, видимо, применять и другие методы, с теми или иными характерными особенностями в каждом подходе (см. /II-I4/ и ссылки в /I5,I6/). В частности, метод /I4/ можно применить к некоторым изинговским моделям с диагональным перекрестным взаимодействием, которые, по всей видимости, родственны моделям свободных фермионов /I9,20/ *).

2. Начнем обсуждение с задачи на треугольной решетке (рис.Iб). Такую решетку удобно рассматривать как прямоугольную (рис.Iа), в которой включено дополнительное диагональное взаимодействие в каждой элементарной ячейке. Будем нумеровать узлы решетки парами целых чисел (m, n); $m, n =$ I,2, ... , L , где L - длина ребра решетки. В узлах находятся спиновые переменные $x_{mn} = \pm 1$. Общее число узлов и спиновых переменных $N = L^2$; в конце вычислений полагаем $N \to \infty$, а в ходе вычислений будем пренебрегать граничными эффектами, исчезающими при $N \to \infty$ (как для Δ-ной решетки, так и во всех других случаях).

Гамильтониан задачи на Δ-ной решетке можем записать в виде:

$$-\beta H_\Delta = \sum_{m=1}^{L}\sum_{n=1}^{L}\left(b_1 x_{mn}x_{m+1n} + b_2 x_{m+1n}x_{m+1n+1} + b_0 x_{mn}x_{m+1n+1}\right), \qquad \beta = 1/kT, \tag{I}$$

при $b_0 = 0$ получаем задачу на прямоугольной решетке.

Требуется вычислить свободную энергию f_Δ , или, что то же самое, главную асимптотику (при $N \to \infty$) статистической суммы

$$Z_\Delta = \sum_{\{x_{mn}=\pm 1\}} e^{-\beta H_\Delta} = e^{-N\beta f_\Delta},$$

$$-\beta f_\Delta = \left[\frac{1}{N}\ln Z_\Delta\right]_{N\to\infty}. \tag{2}$$

*) Автор благодарит А.И.Бугрия за обсуждение этого вопроса.

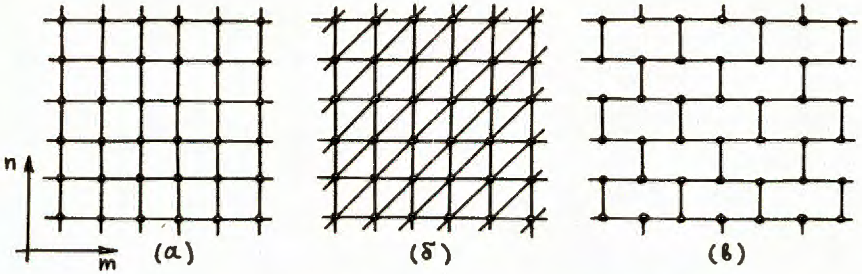


Рис.I. Различные двумерные решетки: (а) прямоугольная; (б) треугольная; (в) гексагональная .

В выражении для Z_Δ производится усреднение матрицы плотности $e^{-\beta H_\Delta}$ по всем спиновым состояниям системы. В дальнейшем будем использовать нормированное спиновое среднее:

$$\underset{(x)}{Sp}\{\dots\} = \prod_{(mn)}\left\{\frac{1}{2}\sum_{x_{mn}=\pm 1}(\dots)\right\}. \tag{3}$$

Гамильтониан (I) будет удобно рассматривать как сумму по "элементарным треугольникам" из связей между спинами x_{mn} , x_{m+1n} , x_{m+1n+1} (см. рис.2б), приписывая всему треугольнику индекс (mn). Для упрощения записи введем локальную нумерацию и для каждого фиксированного (mn) обозначим : $x_1 = x_{mn}$, $x_2 = x_{m+1n}$, $x_3 = x_{m+1n+1}$ (см. также рис.2б), в соответствии с правилом:

$$(x_1, x_2, x_3)_{mn} = (x_{mn}, x_{m+1n}, x_{m+1n+1}). \tag{4}$$

Матрицу плотности в (2) можно тогда рассматривать как произведение по всем "треугольникам больцмановских весов" вида:

$$\left(e^{b_1 x_1 x_2 + b_2 x_2 x_3 + b_0 x_1 x_3}\right)_{mn} = \left(\overset{3}{\underset{1\quad 2}{\triangle}}\right)_{mn}, \tag{5}$$

которые и будут играть роль элементарных весов в дальнейшем. В случае прямоугольной решетки ($b_0 = 0$), вместо "треугольника" имеем "угол", см. рис.2а. В промежуточных выкладках индекс (mn) будем иногда опускать.

Воспользуемся теперь известным равенством *) :

*) Очевидно, $e^{\pm b} \equiv \operatorname{ch} b \pm \operatorname{sh} b$; поскольку $(x_i x_j) = \pm 1$, тождество справедливо.

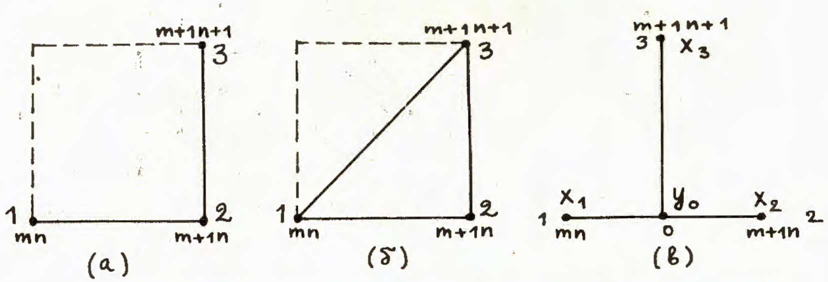


Рис.2. Локальная нумерация спиновых переменных и больцмановских весов для трех типов решеток.

$$e^{b x_i x_j} = ch\, b + x_i x_j \cdot sh\, b = (1-t^2)^{-1/2}\cdot(1+t\, x_i x_j)\,, \qquad t \equiv th\, b. \tag{6}$$

Тогда для (5) можем записать:

$$e^{b_1 x_1 x_2 + b_2 x_2 x_3 + b_0 x_1 x_3} = (1-t_1^2)^{-\frac{1}{2}}(1-t_2^2)^{-\frac{1}{2}}(1-t_0^2)^{-\frac{1}{2}}(1+t_1 x_1 x_2)\cdot (1+t_2 x_2 x_3)(1+t_0 x_1 x_3)\,, \qquad t_j \equiv th\, b_j\,, \tag{7a}$$

перемножая, далее, факторы с учетом свойства $x_j^2 = +1$, находим:

$$(1+t_1 x_1 x_2)(1+t_2 x_2 x_3)(1+t_0 x_1 x_3) = (1+t_0 t_1 t_2) + (t_1 + t_0 t_2)\, x_1 x_2 + (t_2 + t_0 t_1)\, x_2 x_3 + (t_0 + t_1 t_2)\, x_1 x_3. \tag{7б}$$

Отсюда следует, что задача на Δ-ной решетке приводится к вычислению приведенной статистической суммы вида:

$$Q = \underset{(x)}{Sp}\left\{\prod_{mn}(\alpha_0 + \alpha_1\cdot x_1 x_2 + \alpha_2\cdot x_2 x_3 + \alpha_3\cdot x_1 x_3)_{mn}\right\}, \tag{8}$$

где усреднение Sp определено в (3), скобки $(\cdots)_{mn}$ раскрываются по правилу (4), и где, в случае Δ-ной решетки,

$$\alpha_0 = 1 + t_0 t_1 t_2\,, \quad \alpha_1 = t_1 + t_0 t_2\,, \quad \alpha_2 = t_2 + t_0 t_1\,, \quad \alpha_3 = t_0 + t_1 t_2\,. \tag{9}$$

Полная статистическая сумма и свободная энергия для Δ-ной решетки выражаются следующим образом (см. (2)):

$$Z_\Delta = (2R_\Delta)^N\cdot Q_\Delta\,, \qquad -\beta f_\Delta = \ln(2R_\Delta) + \left(\frac{1}{N}\ln Q_\Delta\right)_{N\to\infty}, \tag{10}$$

где $R_\Delta = (1-t_1^2)^{-\frac{1}{2}}(1-t_2^2)^{-\frac{1}{2}}(1-t_3^2)^{-\frac{1}{2}}$ и Q_Δ получается из Q (8) при подстановке (9); $t_j \equiv th\, b_j$ $(j=0,1,2)$; двойка появляется в (10) из-за нормировки Sp (3).

В частном случае $t_0 = 0$ получаем отсюда прямоугольную решетку. Условие $t_0 = 0$ не меняет структуры (10) и не влияет на ход дальнейших вычислений.

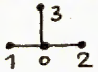
Покажем, что и задача на гексагональной решетке приводится к вычислению Q (8). Такую решетку можно рассматривать как составленную из трехлучевых "звезд" (см. рис.2в), при этом спиновые переменные удобно разделить на два класса: для данного (mn) в центре 3-звезды располагается переменная y_{mn}, на концах лучей располагаются переменные x_{mn}, x_{m+1n}, x_{m+1n+1} (рис.2в). С точностью до граничных эффектов имеем равное число N переменных x_{mn} и переменных y_{mn}, общее число спинов $2N$. Гамильтониан гексагональной решетки можем тогда записать в виде:

$$-\beta H_{\star} = \sum_{mn}\left[b_1 y_{mn} x_{mn} + b_2 y_{mn} x_{m+1n} + b_3 y_{mn} x_{m+1n+1}\right]. \tag{11}$$

Вводя локальную нумерацию (рис.2в):

$$(y_0, x_1, x_2, x_3)_{mn} = (y_{mn}, x_{mn}, x_{m+1n}, x_{m+1n+1}), \tag{12}$$

имеем элементарный больцмановский вес:



$$\left(\;\cdot\;\right)_{mn} = \left(e^{b_1 y_0 x_1 + b_2 y_0 x_2 + b_3 y_0 x_3}\right)_{mn} = \left\{(1-t_1^2)^{-\frac{1}{2}}(1-t_2^2)^{-\frac{1}{2}}(1-t_3^2)^{-\frac{1}{2}}(1+t_1 y_0 x_1)(1+t_2 y_0 x_2)(1+t_3 y_0 x_3)\right\}_{mn}. \tag{13}$$

Заметим теперь, что переменная $(y_0)_{mn} = y_{mn}$ с данными (mn) входит в единственный вес (13) и не встречается в других весах. Можем, поэтому, просуммировать по всем y_{mn} независимо в каждой конфигурации, что дает:

$$\frac{1}{2}\sum_{y_0=\pm 1}(1+t_1 x_1 y_0)(1+t_2 x_2 y_0)(1+t_3 x_3 y_0) = 1 + (t_1 t_2)\, x_1 x_2 + (t_2 t_3)\, x_2 x_3 + (t_1 t_3)\, x_1 x_3\,; \tag{14}$$

получили трехспиновый полином, аналогичный по структуре (7б), и задача опять приводится к вычислению Q (8). Учитывая, что общее число спинов на исходной решетке было $2N$, для полной статистической суммы модели на гексагональной решетке получаем:

$$Z_{\diamond} = 2^{2N} (R_{\diamond})^{N} \cdot Q_{\diamond} , \tag{15а}$$

$$R_{\diamond} = (1-t_1^2)^{-\frac{1}{2}}(1-t_2^2)^{-\frac{1}{2}}(1-t_3^2)^{-\frac{1}{2}} ,$$

где $Q_{\diamond}$ получается из (8) при подстановке:

$$\alpha_0 = 1 , \quad \alpha_1 = t_1 t_2 , \quad \alpha_2 = t_2 t_3 , \quad \alpha_3 = t_1 t_3 , \tag{15б}$$

здесь $t_j \equiv \operatorname{th} \beta_j$, где β_j – параметры в (II). Для свободной энергии имеем:

$$-\beta f_{\diamond} = \frac{1}{2N} \ln Z_{\diamond} \Big|_{N\to\infty} = \tag{15в}$$

$$= \ln 2 + \frac{1}{2} \ln R_{\diamond} + \frac{1}{2N} \ln Q_{\diamond} \Big|_{N\to\infty} .$$

3. Для явного вычисления Q (8) перейдем к построению грассманова представления для Q. Эта задача решается в духе зеркальной грассмановой факторизации /9,I5,I6/. В качестве введения к дальнейшим вычислениям см. /I5/.

Начнем с факторизации трехспинового полинома - элементарного больцмановского веса в Q (8):

$$(\mathcal{P}_{123})_{mn} = (\alpha_0 + \alpha_1 x_1 x_2 + \alpha_2 x_2 x_3 + \alpha_3 x_1 x_3)_{mn} . \tag{16}$$

В дальнейшем индекс (mn) фиксируется и явно не выписывается.

Для факторизации (I6) достаточно будет ввести только два сорта грассмановых переменных *). С этой целью будем искать полином $\mathcal{P}_{123}$ в виде:

$$\mathcal{P}_{123} = (\alpha_0 - \eta) + \eta \left(\frac{\alpha_1}{\eta} x_1 + x_2\right)\left(x_2 + \frac{\alpha_2}{\eta} x_3\right) = \tag{17}$$

$$= \alpha_0 + \alpha_1 x_1 x_2 + \alpha_2 x_2 x_3 + \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\eta} x_1 x_3 ,$$

видим, что η надо выбрать из условия $\alpha_1 \alpha_2 / \eta = \alpha_3$, в дальнейшем считаем тождественно $\alpha_1 \alpha_2 / \eta \equiv \alpha_3$.

*) При прямом обобщении метода /I5/, как и других подходов, для Δ- ной решетки потребовалось бы 6 сортов переменных (см.также /9/); даже для прямоугольной решетки здесь вводится 4 сорта переменных.

Далее, вводим две грассмановых переменных $c, \bar{c}$ и определяем усреднение с гауссовским весом:

$$\underset{(c)}{Sp} (\dots) = \int d\bar{c}\, dc\, e^{\lambda c \bar{c}} (\dots) , \tag{18}$$

где λ – параметр. Грассмановы интегралы определяются как обычно (Березин /I0/): $\int dc \cdot 1 = 0$, $\int dc \cdot c = 1$, $\int d\bar{c} \cdot 1 = 0$, $\int d\bar{c} \cdot \bar{c} = 1$. Переменные, как и дифференциалы, антикоммутируют на ноль; при этом $c^2 = \bar{c}^2 = 0$. Из элементарных правил интегрирования немедленно следуют правила усреднения для (I8):

$$\underset{(c)}{Sp}(1) = \lambda , \quad \underset{(c)}{Sp}(c\bar{c}) = 1 , \tag{19}$$

$$\underset{(c)}{Sp}(c) = 0 , \quad \underset{(c)}{Sp}(\bar{c}) = 0 ;$$

сохраняются только четные степени переменных. Воспользовавшись представлением (I7) и правилами (I9), можем факторизовать $\mathcal{P}_{123}$ следующим образом:

$$\mathcal{P}_{123} = (\alpha_0 - \eta) + \eta \left(\frac{\alpha_1}{\eta} x_1 + x_2\right)\left(x_2 + \frac{\alpha_2}{\eta} x_3\right) = \tag{20}$$

$$= \int d\bar{c}\, dc\, e^{(\alpha_0 - \eta) c \bar{c}} \left[1 + c\sqrt{\eta}\left(\frac{\alpha_1}{\eta} x_1 + x_2\right)\right] \bullet$$

$$\bullet \left[1 + \bar{c}\sqrt{\eta}\left(x_2 + \frac{\alpha_2}{\eta} x_3\right)\right] = \int d\bar{c}\, dc\, e^{\alpha_0 c \bar{c}} \bullet$$

$$\bullet \left(1 + c \frac{\alpha_1}{\sqrt{\eta}} x_1\right)\left(1 + \sqrt{\eta}(c + \bar{c}) x_2\right)\left(1 + \bar{c} \frac{\alpha_2}{\sqrt{\eta}} x_2\right) ,$$

$$\alpha_1 \alpha_2 / \eta \equiv \alpha_3 .$$

В последнем равенстве получили желаемую факторизацию, когда все три спиновых переменных распределены по отдельным факторам /I5/.

Можем провести факторизацию (20) во всех узлах (mn), вводя в каждом узле пару независимых переменных c_{mn}, $\bar{c}_{mn}$, что дает:

$$(\mathcal{P}_{123})_{mn} = \tag{20а}$$

$$= \int d\bar{c}_{mn}\, dc_{mn}\, e^{\alpha_0 c_{mn} \bar{c}_{mn}} \left\{ A^{(1)}_{mn} A^{(2)}_{m+1n} A^{(3)}_{m+1n+1} \right\} ,$$

где

$$A^{(1)}_{mn} = 1 + \frac{\alpha_1}{\sqrt{\eta}} X_{mn} C_{mn} ,$$

$$A^{(2)}_{m+1n} = 1 + \sqrt{\eta}\,(C_{mn} + \bar{C}_{mn}) X_{m+1n} , \qquad (20б)$$

$$A^{(3)}_{m+1n+1} = 1 + \frac{\alpha_2}{\sqrt{\eta}} \bar{C}_{mn} X_{m+1n+1} ;$$

индексы у факторов здесь соответствуют индексу у спиновой переменной.

Произведение $(\mathcal{P}_{123})_{mn}$ по всем (mn) дает матрицу плотности для Q (8). Мы могли бы просуммировать в этом произведении по каждой переменной X_{mn} в отдельности (подобно суммированию по y_0 в (I4)) и получить чисто грассманово представление для Q, если бы в процессе суммирования имели рядом факторы с одинаковым индексом (mn), содержащие одну и ту же переменную X_{mn}. Это требование осуществляется за счет "зеркальной" перестройки всего произведения /I5/. Возможность зеркального упорядочения можно, видимо, рассматривать как универсальное свойство двумерных пространств.

Выделим общее усреднение по всем грассмановым парам, которое реализуется при перемножении $(\mathcal{P}_{123})_{mn}$:

$$\underset{(C)}{Sp}\,\{\ldots\} = \int \prod_{mn} d\bar{C}_{mn}\, dC_{mn}\, e^{\alpha_0 C_{mn} \bar{C}_{mn}} \{\ldots\} . \qquad (21)$$

Для матрицы плотности имеем:

$$\hat{Q} = \prod_{mn} (\mathcal{P}_{123})_{mn} = \underset{(C)}{Sp} \Big\{ \prod_{mn} \Big[A^{(1)}_{mn} A^{(2)}_{m+1n} A^{(3)}_{m+1n+1} \Big] \Big\} . \qquad (22)$$

Отдельные факторы (20б) не коммутируют, но тройки, составляющие $(\mathcal{P}_{123})_{mn}$, тотально коммутируют под знаком среднего (2I), поскольку содержащиеся в них линейные по C_{mn}, $\bar{C}_{mn}$ члены эффективно равны нулю, как следует из построения.

Используя это обстоятельство, можно перестроить (22) к виду, удобному для суммирования по спиновым переменным:

$$\hat{Q} = \underset{(C)}{Sp} \Big\{ \overset{n}{\overrightarrow{\prod_{(n)}}} \Big[\overset{m}{\overleftarrow{\prod_{(m)} A^{(3)}_{mn}}} \cdot \overset{m}{\overrightarrow{\prod_{(mn)} A^{(2)}_{mn} A^{(1)}_{mn}}} \Big] \Big\} , \qquad (23)$$

где в квадратных скобках m -произведения упорядочены в направлениях, указанных стрелками, и квадратные скобки в целом упорядочены по n с ростом n слева направо; представление (23)

эквивалентно (22) с точностью до граничных эффектов. Преобразования, приводящие от (22) к зеркально-факторизованному представлению (23), совершенно аналогичны проведенным в /I5/ (фактически, с точностью до обозначений), и мы не будем на них здесь останавливаться.

Усреднение $\hat{Q}$ (23) по $\{X_{mn}\}$ сводится к суммированию по отдельным X_{mn} в следующей форме:

$$\underset{(X_{mn})}{Sp} \Big\{ A^{(3)}_{mn} A^{(2)}_{mn} A^{(1)}_{mn} \Big\} = \qquad (23а)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{X_{mn}=\pm 1} \Big\{ \Big(1 + \frac{\alpha_2}{\sqrt{\eta}} \bar{C}_{m-1n-1} X_{mn}\Big) \circledast$$

$$\circledast \Big(1 + \sqrt{\eta}\,(C_{m-1n} + \bar{C}_{m-1n}) X_{mn}\Big)\Big(1 + \frac{\alpha_1}{\sqrt{\eta}} C_{mn} X_{mn}\Big)\Big\} =$$

$$= 1 + (C_{m-1n} + \bar{C}_{m-1n})(\alpha_1 C_{mn} - \alpha_2 \bar{C}_{m-1n-1}) +$$

$$+ \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\eta} \bar{C}_{m-1n-1} C_{mn} = \exp\Big\{ \alpha_3 \bar{C}_{m-1n-1} C_{mn} +$$

$$+ (C_{m-1n} + \bar{C}_{m-1n})(\alpha_1 C_{mn} - \alpha_2 \bar{C}_{m-1n-1}) \Big\} ,$$

здесь сразу учтено, что $\alpha_1 \alpha_2 / \eta \equiv \alpha_3$.

В самом деле, при данном n на "стыке" m – произведений в (23) уже имеем исходную тройку факторов (23а) с $m = 1$; выполняя усреднение, получаем коммутирующий экспоненциальный множитель, который выносим "за скобку"; затем суммируем по X_{mn} при $m = 2$, и далее $m = 3, 4, \ldots, L$, для данного n, и все заново для других n.

В результате для Q получается чисто грассманово представление в виде произведения факторов (24) с усреднением (2I), или в явном виде:

$$Q = \int \prod_{m=1}^{L} \prod_{n=1}^{L} d\bar{C}_{mn}\, dC_{mn} \cdot \exp\Big\{ \sum_{m=1}^{L} \sum_{n=1}^{L} \Big[\alpha_0 C_{mn} \bar{C}_{mn} +$$

$$+ (C_{m-1n} + \bar{C}_{m-1n})(\alpha_1 C_{mn} - \alpha_2 \bar{C}_{m-1n-1}) +$$

$$+ \alpha_3 \bar{C}_{m-1n-1} C_{mn} \Big] \Big\} , \qquad (24)$$

где считаем:

$$C_{m0} = C_{mL}\,, \qquad C_{0n} = C_{Ln}\,,$$
$$\bar C_{m0} = \bar C_{mL}\,, \qquad \bar C_{0n} = \bar C_{Ln}\,. \tag{24a}$$

Здесь мы явно выписали пределы суммирования по m, n и ввели граничные условия для грассмановых переменных (24а) *). Таким образом, получено представление для полиномиальной статистической суммы Q (8) в виде гауссовского интеграла по грассмановым переменным; как и обычные гауссовские интегралы, такие интегралы легко вычисляются /10/.

Квадратичную форму в (24) будем в дальнейшем называть "действием" и обозначать S. При этом, ввиду дальнейшего перехода в импульсное представление, удобно сдвинуть индекс (mn), принимая за независимые переменные $C_{0n}, \bar C_{0n}, C_{m0}, \bar C_{m0}$ и интерпретируя переменные с индексом L в соответствии с (24а). Действие можем тогда записать в виде:

$$S = \sum_{m=0}^{L-1}\sum_{n=0}^{L-1}\Big[\alpha_0 C_{mn}\bar C_{mn} - \alpha_1 C_{m+1n}\bar C_{mn} - \tag{25}$$
$$- \alpha_2 C_{mn+1}\bar C_{mn} - \alpha_3 C_{m+1n+1}\bar C_{mn} +$$
$$+ \alpha_1 C_{mn} C_{m+1n} + \alpha_2 \bar C_{mn}\bar C_{mn+1}\Big]\,.$$

4. Для вычисления интеграла с действием (25) делаем преобразование Фурье (переход в импульсное представление):

$$C_{mn} = \frac{1}{L}\sum_{p=0}^{L-1}\sum_{q=0}^{L-1} C_{pq}\, e^{+i\frac{2\pi}{L}(mp+nq)}\,, \tag{26a}$$

$$\bar C_{mn} = \frac{1}{L}\sum_{p=0}^{L-1}\sum_{q=0}^{L-1} \bar C_{pq}\, e^{-i\frac{2\pi}{L}(mp+nq)}\,. \tag{26б}$$

Можем принять C_{pq}, $\bar C_{pq}$ за новые независимые переменные и перейти от интеграла по dC_{mn}, $d\bar C_{mn}$ к интегралу по dC_{pq}, $d\bar C_{pq}$. В силу унитарности преобразования Фурье, Якобиан пере-

---

*) В процессе построения (24) мы не следили детально за граничными членами, допуская аппроксимации на границе, что несущественно при $N \equiv L^2 \to \infty$. Конкретизацию суммы по (mn) и граничных условий в (24) следует рассматривать как еще одну аппроксимацию на границе. Более тонкие методы расчетов, позволяющие не пренебрегать граничными эффектами, см. в /16/.

хода равен 1. Подставляя (26) в (25), для действия в импульсном представлении находим:

$$S = \sum_{p=0}^{L-1}\sum_{q=0}^{L-1}\Big[C_{pq}\bar C_{pq}\Big(\alpha_0 - \alpha_1 e^{i\frac{2\pi p}{L}} - \alpha_2 e^{i\frac{2\pi q}{L}} - \tag{27}$$
$$- \alpha_3 e^{i\frac{2\pi}{L}(p+q)}\Big) - C_{pq} C_{L-pL-q}\,\alpha_1 e^{i\frac{2\pi p}{L}} -$$
$$- \bar C_{L-pL-q}\bar C_{pq}\,\alpha_2 e^{i\frac{2\pi q}{L}}\Big]\,.$$

Заметим, что когда точка $f = (p, q)$ пробегает всю периодическую решетку, точка $-f = (L-p, L-q)$ пробегает ту же решетку в обратном порядке. Переменные с индексом f и $-f$ взаимодействуют в (27). Выпишем явно часть интеграла для Q с действием (27) по переменным $C_f, \bar C_f, C_{-f}, \bar C_{-f}$ с данным фиксированным f (считаем $f \neq -f$, все переменные тогда независимы):

$$I_f^2 = \int d\bar C_f\, dC_f\, d\bar C_{-f}\, dC_{-f}\cdot \exp\Big\{\lambda_f C_f\bar C_f + \tag{28}$$
$$+ \lambda_f^* C_{-f}\bar C_{-f} - (\omega_f - \omega_f^*)C_f C_{-f} - (\omega'_f - \omega'^*_f)\bar C_{-f}\bar C_f\Big\},$$

где обозначено:

$$\lambda_f = \alpha_0 - \alpha_1 e^{i\frac{2\pi p}{L}} - \alpha_2 e^{i\frac{2\pi q}{L}} - \alpha_3 e^{i\frac{2\pi}{L}(p+q)}\,, \tag{28a}$$
$$\omega_f = \alpha_1 e^{i\frac{2\pi p}{L}}\,, \quad \omega'_f = \alpha_2 e^{i\frac{2\pi q}{L}}\,;$$
$$\lambda_f^* \equiv \lambda_{-f}\,, \quad \omega_f^* \equiv \omega_{-f}\,, \quad \omega'^*_f \equiv \omega'_{-f}\,.$$

В оставшуюся часть общего интеграла представленные здесь переменные уже не входят, интеграл факторизуется в произведение интегралов (28) по всем различным парам $(f; -f)$. Мы исчерпаем все такие пары, если переберем только половину значений f; если же возьмем произведение вообще по всем $f = (p, q)$, $0 \le p, q \le L-1$, то каждый сомножитель будет учитываться дважды, и мы получим квадрат статистической суммы*):

$$Q^2 = \prod_{f=0}^{L-1} I_f^2 = \prod_{p=0}^{L-1}\prod_{q=0}^{L-1}\left\{I_f^2\right\}. \tag{29}$$

---

*) Рассуждения, приводящие к (29)-(31) справедливы с точностью до нескольких возможных особых случаев, когда $f = -f$. Соответствующие интегралы следует вычислить отдельно, и оказывается, что их квадраты правильно представлены в (31).

Интеграл I^2_f можно вычислить различными способами. Например, оставляя в экспоненте диагональные члены $c_f \bar{c}_f$ и $c_{-f}\bar{c}_{-f}$, разлагая оставшуюся часть в ряд и применяя правила отбора типа (I9), находим *):

$$I^2_f = \lambda_f \lambda^*_f + (\omega_f - \omega^*_f)(\omega'_f - \omega'^*_f) =$$

$$= \left| \alpha_0 - \alpha_1 e^{i\frac{2\pi p}{L}} - \alpha_2 e^{i\frac{2\pi q}{L}} - \alpha_3 e^{i\frac{2\pi}{L}(p+q)} \right|^2 - \tag{30}$$

$$- 4\alpha_1\alpha_2 \sin\frac{2\pi p}{L} \sin\frac{2\pi q}{L} = (\alpha_0^2 + \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2) -$$

$$- 2(\alpha_0\alpha_1 - \alpha_2\alpha_3)\cos\frac{2\pi p}{L} - 2(\alpha_0\alpha_2 - \alpha_1\alpha_3)\cos\frac{2\pi q}{L} -$$

$$- 2(\alpha_0\alpha_3 - \alpha_1\alpha_2)\cos\frac{2\pi}{L}(p+q).$$

Таким образом, с точностью до граничных эффектов, исчезающих при $N = L^2 \to \infty$, для Q (8) имеем в явном виде:

$$Q = \underset{(x)}{Sp}\left\{ \prod_{mn} (\alpha_0 + \alpha_1 x_{mn} x_{m+1n} + \alpha_2 x_{m+1n} x_{m+1n+1} + \right.$$

$$\left. + \alpha_3 x_{mn} x_{m+1n+1}) \right\} = \left\{ \prod_{p=0}^{L-1} \prod_{q=0}^{L-1} \left[(\alpha_0^2 + \alpha_1^2 + \right.\right. \tag{31}$$

$$+ \alpha_2^2 + \alpha_3^2) - 2(\alpha_0\alpha_1 - \alpha_2\alpha_3)\cos\frac{2\pi p}{L} -$$

$$\left.\left. - 2(\alpha_0\alpha_2 - \alpha_1\alpha_3)\cos\frac{2\pi q}{L} - 2(\alpha_0\alpha_3 - \alpha_1\alpha_2)\cos\frac{2\pi}{L}(p+q) \right] \right\}^{1/2}.$$

Логарифмируя и переходя к пределу $N \equiv L^2 \longrightarrow \infty$, для соответствующей свободной энергии немедленно получаем:

$$-\beta f_Q = \left(\frac{1}{N} \ln Q \right)_{N\to\infty} = \tag{32}$$

$$= \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} \ln \left[(\alpha_0^2 + \alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2) - 2(\alpha_0\alpha_1 - \right.$$

$$\left. - \alpha_2\alpha_3)\cos\omega_1 - 2(\alpha_0\alpha_2 - \alpha_1\alpha_3)\cos\omega_2 - 2(\alpha_0\alpha_3 - \alpha_1\alpha_2)\cos(\omega_1+\omega_2) \right].$$

Формула (32) содержит в себе явные выражения для свободных энергий на прямоугольной, треугольной и гексагональной решетках; эти случаи реализуются при конкретизации α_j через параметры $t_j \equiv th\, b_j$ и

---

*) Можно было бы воспользоваться общей формулой (Березин /I0/): $\int d\bar{\eta}\, d\eta\, e^{\eta \hat{A} \bar{\eta}} = \det \hat{A}$; в данном случае имеем простейший детерминант второго порядка.

учета нормировочных множителей R, см. формулы (9), (I0) и (I5). Проводя вычисления и учитывая элементарные тождества: $sh\, 2b = 2t/(1-t^2)$, $ch\, 2b = (1+t^2)/(1-t^2)$, $t \equiv th\, b$, для полных свободных энергий находим:

$$-\beta f_{\square} = \ln 2 + \frac{1}{2}\iint_0^{2\pi} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{(2\pi)^2} \ln\left[C_1C_2 - S_1\cos\omega_1 - S_2\cos\omega_2 \right]; \tag{33}$$

$$-\beta f_{\Delta} = \ln 2 + \frac{1}{2}\iint_0^{2\pi} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{(2\pi)^2} \ln\left[C_0C_1C_2 + S_0S_1S_2 - \right. \tag{34}$$

$$\left. - S_1\cos\omega_1 - S_2\cos\omega_2 - S_0\cos(\omega_1+\omega_2) \right];$$

$$-\beta f_{\circ} = \ln 2 + \frac{1}{4}\iint_0^{2\pi} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{(2\pi)^2} \ln\left\{ \frac{1}{2}\left[C_1C_2C_3 + 1 - \right.\right.$$

$$\left.\left. - S_1S_2\cos\omega_1 - S_2S_3\cos\omega_2 - S_1S_3\cos(\omega_1+\omega_2) \right] \right\}, \tag{35}$$

где $C_j \equiv ch\, 2b_j$, $S_j \equiv sh\, 2b_j$, b_j - параметры в соответствующих гамильтонианах.

Формула (33) для свободной энергии на прямоугольной решетке представляет собой знаменитый результат Онсагера /I/. Обобщение на случай треугольной решетки (34) было впервые опубликовано несколькими авторами в I950 году в рамках трансфер-матричного формализма (см. обсуждение и ссылки в обзоре Сиози /I7/). Результаты для гексагональной решетки (35) в канонических подходах получают обычно из формул для треугольной решетки, применяя соотношения "звезда-треугольник" /6,I7/ . Подробный анализ модели Изинга на треугольной и гексагональной решетках был позднее проведен Стефенсоном /I8/ в рамках комбинаторного метода пфаффиана /4/ .

Можно сравнить классические методы решения рассмотренных задач, требующие весьма трудоемких вычислений,с по-существу элементарным выводом гауссовского грассманова представления (24), откуда немедленно следует явное выражение для Q в универсальной для всех решеток параметрической форме (3I).

5. Рассмотренный выше метод вычисления статистической суммы трехспиновых полиномов (8), (3I) легко обобщается и на модели типа свободных фермионов Фана - Ву /I9,20/ . Эта модель является специальным решаемым случаем класса 8-вершинных моделей /6/. Сюда же входит и более сложная модель Бакстера /6/ . Модели этого типа можно переформулировать как модель Изинга на прямоугольной решетке с пересекающимися диагональными и 4-спиновым взаимодействиями, показанными на рис. 3 (см.подробнее /6/).

В такой формулировке задачу можно привести к вычислению статистической суммы для четырехспиновых полиномов:

$$Q = \mathop{Sp}_{(x)} \left\{ \prod_{mn} (\mathcal{P}_{1234})_{mn} \right\}, \qquad (\mathcal{P}_{1234})_{mn} =$$
$$= \Big(1 + \sum_{1 \le i < j \le 4} f_{ij} x_i x_j + f_{1234} x_1 x_2 x_3 x_4 \Big)_{mn}, \tag{36}$$

где локальная нумерация (1,2,3,4) связана с нумерацией по всей решетке в соответствии с рис.3.

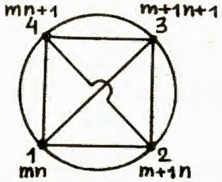


Рис. 3

При специальном соотношении между параметрами f_{ij}, f_{1234} для Q можно построить гауссовское представление, в общем же случае представление получается негауссовское. Чтобы прояснить имеющиеся здесь возможности, рассмотрим вопрос о факторизации четырехспинового полинома в общем виде.

Введем 4 грассмановых переменных c_1, c_2, c_3, c_4 и определим нормированное среднее:

$$\langle \ldots \rangle_\omega = \frac{\int dc_4\, dc_3\, dc_2\, dc_1\, e^{\sum_{j>i} \omega_{ij} c_i c_j} (\ldots)}{\int dc_4\, dc_3\, dc_2\, dc_1\, e^{\sum_{j>i} \omega_{ij} c_i c_j}}, \tag{37}$$

где ω_{ij} – параметры. Будем искать $\mathcal{P}_{1234}$ (36) в факторизованной форме:

$$\mathcal{P}_{1234} = \langle (1 + A_1 x_1)(1 + A_2 x_2)(1 + A_3 x_3)(1 + A_4 x_4) \rangle_\omega =$$
$$= 1 + \sum_{j>i} \langle A_i A_j \rangle_\omega x_i x_j + \langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle x_1 x_2 x_3 x_4, \tag{38}$$

где A_j – некоторые линейные формы по c_1, c_2, c_3, c_4. Если представление (36) в виде (38) возможно при каком-либо выборе ω_{ij} и A_j, то задача решаема (в полной аналогии с проведенным выше вычислением для (8)). Параметры ω_{ij} и A_j всегда можем подобрать так, чтобы было: $f_{ij} = \langle A_i A_j \rangle_\omega$, при этом $f_{1234} = \langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle_\omega$, но по теореме Вика:

$$\langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle = \langle A_1 A_2 \rangle \langle A_3 A_4 \rangle + \langle A_2 A_3 \rangle \langle A_1 A_4 \rangle - \langle A_1 A_3 \rangle \langle A_2 A_4 \rangle. \tag{39}$$

Это означает, что $\mathcal{P}_{1234}$ представим в виде (38), если удовлетворяется условие:

$$f_{1234} + f_{13} f_{24} - f_{12} f_{34} - f_{14} f_{23} = 0. \tag{40}$$

В этом случае для Q (36) можно построить гауссово представление и вычислить интеграл.

Условие (40) неизбежно возникает, если берем затравочное действие в (37) квадратичным, как следствие теоремы Вика. Следуя Фану и Ву /19,20/, будем называть условие (40) условием "свободных фермионов". В случае свободных фермионов изинговская задача (36) эквивалентна трансфер-матричной задаче свободных фермионов /19,20/. Эти вопросы обсудим подробнее в другой работе; приведем здесь только некоторые результаты.

При практическом вычислении Q вместо (37) удобнее исходить из ненормированного среднего; в качестве A_j можно взять просто c_j, параметры гауссовского веса при этом нетрудно подобрать так, чтобы было $f_{ij} = \langle c_i c_j \rangle$. В результате можно получить для Q (36) (при выполнении условия (40)) представление: $Q = \int \mathcal{D}\, e^{S_0}$, с действием:

$$S_0 = \sum_{mn} \Big\{ f_{12} c_{mn}^{(1)} c_{mn}^{(2)} + f_{23} c_{mn}^{(2)} c_{mn}^{(3)} + f_{34} c_{mn}^{(3)} c_{mn}^{(4)} +$$
$$+ f_{14} c_{mn}^{(1)} c_{mn}^{(4)} - f_{13} c_{mn}^{(1)} c_{mn}^{(3)} - f_{24} c_{mn}^{(2)} c_{mn}^{(4)} -$$
$$- c_{mn}^{(1)} c_{m-1n}^{(2)} - c_{m-1n-1}^{(3)} c_{mn-1}^{(4)} - (c_{mn}^{(1)} + c_{m-1n}^{(2)}) \cdot \tag{41}$$
$$\cdot (c_{m-1n-1}^{(3)} + c_{mn-1}^{(4)}) \Big\}.$$

Если же не накладывать ограничения (40), то можно воспроизвести полином (36) в факторизованном виде, подбирая негауссовский вес при факторизации и нарушая, тем самым, теорему Вика. В этом случае получаем действие

$$S_1 = S_0 + \sum_{mn} \left(\Delta \cdot c_{mn}^{(1)} c_{mn}^{(2)} c_{mn}^{(3)} c_{mn}^{(4)} \right),$$
$$\Delta \equiv f_{1234} + f_{13} f_{24} - f_{12} f_{34} - f_{14} f_{23}. \tag{42}$$

Вся схема без труда обобщается и на неоднородный случай, когда в (36) f_{ij} зависят от (mn): $f_{ij} \longrightarrow f_{mn}^{(ij)}$. Это приводит просто к замене f_{ij}, f_{1234}, Δ на $f_{mn}^{(ij)}, f_{mn}^{(1234)}, \Delta_{mn}$ в (41) и (42). Негауссовские интегралы (42) с $\Delta \neq 0$ соответствуют общим 8-вершинным моделям, включая и модель Бакстера, однако не известны регулярные методы вычисления таких интегралов. Поиски таких методов представляют, конечно, большой интерес. Среди прочего, это могло бы привести к точным результатам для двумерной модели Изинга в ненулевом поле.

Автор выражает благодарность Н.Н.Боголюбову (мл.), А.И.Бугрию, В.Б.Приезжеву и А.С.Шумовскому за интерес к работе и ценные обсуждения.

Литература

1. Onsager L. Phys.Rev., 1944, 65, No. 3/4, p.117.
2. Newell G.F., Montroll E.W. Rev.Mod.Phys., 1953, 25, No.2, p.353.
3. Schultz T.D., Mattis D.C., Lieb E.H. Rev.Mod.Phys., 1964, 36, No.3, p.856.
4. Green H.S., Hurst C.A. Order-Disorder Phenomena. Interscience, N.Y., 1964.
5. McCoy B.M., Wu T.T. The Two-Dimensional Ising Model. Harvard U. Press, Cambrdige, Mass., 1973.
6. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике, Мир, М., 1985.
7. Perk J.H.H. In "II Intern.Symp. on Selected Topics in Stat. Mechanics". JINR, Dubna, 1981, p.165.
8. Hurst C.A. In: "III Intern.Symp. on Selected Topics in Stat. Mechanics". v. II, JINR, Dubna, 1984, p.288.
9. Плечко В.Н. В тр. "Ш Межд.симп. по избр.пробл.стат.механики". том П, ОИЯИ, Дубна, 1984, с.165.
10. Березин Ф.А. Метод вторичного квантования. "Наука", М., 1965.
11. Березин Ф.А. УМН, 1969, том 24, вып.3, с.3.
12. Фрадкин Е.С. В кн.: Проблемы теоретической физики. Сборник, посвященный Н.Н.Боголюбову в связи с его шестидесятилетием. "Наука", М., 1969, с.398.
13. Itzykson C. Nucl. Phys., 1982, 210B [FS6], N 4, pp.448, 477.
14. Бугрий А.И. Препринты ИТФ-83-77Р, Киев, 1983; ИТФ-85-114Р, Киев, 1985.
15. Плечко В.Н. ДАН СССР, 1985, 281, №4, с.834. Preprint JINR, E17-84-23, Dubna, 1984.
16. Плечко В.Н. ТМФ, 1985, 64, №1, с.150. Preprint JINR, E17-84-469, Dubna, 1984.
17. Syozi I. In: Phase Transitions and Critical Phenomena, C.Domb and M.S.Green, eds, v.1, Academic Press, London, 1972, p.269.
18. Stephenson J. J.Math.Phys., 1964, v.5, No.8, p.1009; ibid, 1970, v.11, No.2, p.413, 420.
19. C.Fan, F.Y.Wu. Phys.Rev., 1969, 179, No.2, p.560.
20. C.Fan, F.Y.Wu. Phys.Rev.B, 1970, 2B, No.3, p.723.

Рукопись поступила в издательский отдел
23 декабря 1985 года.

Плечко В.Н. P17-85-927

Методы вычислений в двумерных изинговских системах

Предложен метод вычисления статистической суммы и свободной энергии для двумерных изинговских моделей на прямоугольной, треугольной и гексагональной решетках, не требующий матричных или комбинаторных построений. Результаты для всех решеток получаются как частные случаи при расчете обобщенной статистической суммы для трехспиновых полиномов. Кратко обсуждается также схема решения моделей типа свободных фермионов. Применяются интегралы по грассмановым переменным. Уделяется внимание выбору рациональных методов вычислений.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод автора

Plechko V.N. P17-85-927

Method of Calculations in the Two-Dimensional Ising Systems

A method for calculating the partition function and the free energy of the two-dimensional Ising models on the rectangular, triangular and hexagonal lattices is proposed which does not require matrix or combinatorial machinaries. The results for all the lattices follows as particular cases from evaluation of a generalized partition function for three-spin polynomials. A scheme of solving free-fermion-type models is also shortly considered. Use is made of the integrals over Grassmann variables, attention is given to the choice of rational computational devices.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985