сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-84-763

Б.Н.Валуев

О ТРАНСФЕР-МАТРИЦЕ ДЛЯ РЕШЕТКИ ИЗИНГА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

1984

1. Точное выражение для удельной свободной энергии двумерной решетки Изинга в ненулевом магнитном поле до сих пор не получено. Известные случаи предельно сильного поля и мнимого поля[1] /$h = i\pi/2$ в обозначениях формулы /2/, см. ниже/ не содержат существенной информации о точном выражении. Мы предполагаем, что наиболее подходящей для поисков точного решения задачи с полем остается матричная формулировка модели Изинга. Матричная формулировка весьма гибка и позволяет, используя представление для многомерных γ-матриц[2], перейти к формулировке задачи в терминах фермионных операторов[3], и, следуя подходу Янга[4], сравнительно просто и строго вывести[5] онсагеровское выражение для спонтанной намагниченности.

Как и в [5], мы рассматриваем решетку с размерами $n \times m$, свернутую в тор, и выражение статистической суммы Q для этой решетки в виде

$$Q = \mathrm{Sp}\, M^m, \qquad /1/$$

где матрица M, называемая /столбцовой/ трансфер-матрицей, имеет размерность $2^n \times 2^n$.

В настоящем сообщении мы проводим упрощение трансфер-матрицы, используя следующее соображение. Если две матрицы коммутируют, то в представлении, где одна из них упрощается, более простой вид будет иметь и другая. Сначала мы получаем явное выражение для оператора трансляции через фермионные операторы и замечаем, что этот оператор, коммутирующий с трансфер-матрицей, в случае нечетного n можно преобразовать к более простому виду. Затем соответственно преобразуем и трансфер-матрицу. И, наконец, отмечаем, что вычисление спонтанной намагниченности, аналогичное изложенному в [5], в полученном представлении провести легче.

2. Запишем трансфер-матрицу M в симметризованном виде:

$$M = V_3^{1/2} V_2^{1/2} V_1 V_2^{1/2} V_3^{1/2},$$

$$V_1 = (2\,\mathrm{sh}\,2a)^{n/2} A, \quad A = e^{\theta \Sigma X_k}, \quad \mathrm{th}\,\theta = e^{-2a}, \quad a > 0,$$

$$V_2 = e^{b \Sigma Z_k Z_{k+1}}, \qquad /2/$$

$$V_3 = e^{h\sigma}, \quad \sigma = \Sigma Z_k, \quad k = 0, 1, \ldots, n-1.$$

Спиновый оператор X_{k-1} определяется как прямое произведение $n-1$ двумерных единичных матриц I и матрицы Паули σ_x, стоящей в произведении на k - м месте: $X_k = I \times I \times \ldots \times \sigma_x \times \ldots \times I$.

Аналогично определены Z_k и Y_k. Знак суммы без специальных указаний означает суммирование от 0 до $n-1$. Зависимость от температуры включена в параметры a, b, h. Последний пропорционален магнитному полю.

Благодаря циклическим граничным условиям трансфер-матрица инвариантна относительно циклической перестановки $X_k, Z_k \to X_{k+1}, Z_{k+1}$. Будем называть оператор T, порождающий это преобразование, оператором трансляции. Он определяется с точностью до числового множителя любыми двумя из трех условий:

$$T X_k T^{-1} = X_{k+1}, \; T Y_k T^{-1} = Y_{k+1}, \; T Z_k T^{-1} = Z_{k+1}. \qquad /3/$$

Поскольку числовой множитель полностью не фиксируется требованием $T^n = I$, мы сделаем это позже. Важность оператора T определяется тем, что это единственный известный нетривиальный оператор, коммутирующий с трансфер-матрицей при наличии поля. Наиболее естественно оператор T выражается в терминах фермионных операторов. Чтобы получить это выражение, введем $2n$ эрмитовых γ-матриц:

$$\gamma_k = X_0 X_1 \ldots X_{k-1} Z_k, \qquad /4/$$

$$\bar{\gamma}_k = X_0 X_1 \ldots X_{k-1} Y_k, \quad X_k = i \gamma_k \bar{\gamma}_k,$$

матрицу $U = X_0 X_1 \ldots X_{n-1}$, антикоммутирующую со всеми γ_k, $\bar{\gamma}_k$, и определим фермионные операторы $\hat{c}_k$ и эрмитово сопряженные им $\hat{c}_k^+$ с помощью соотношений

$$\gamma_k = \hat{c}_k + \hat{c}_k^+, \quad i\bar{\gamma}_k = \hat{c}_k^+ - \hat{c}_k. \qquad /5/$$

Отметим, что $X_k = 1 - 2\hat{n}_k = (-1)^{\hat{n}_k}$, где $\hat{n}_k = \hat{c}_k^+ \hat{c}_k$, $U = (-1)^{\Sigma \hat{n}_k}$. Условия /3/ теперь можно переписать в виде

$$T \gamma_k T^{-1} = X_0 \gamma_{k+1}, \quad T \bar{\gamma}_k T^{-1} = X_0 \bar{\gamma}_{k+1} \; (k \neq n-1),$$

$$T \gamma_{n-1} T^{-1} = X_0 U \gamma_0, \quad T \bar{\gamma}_{n-1} T^{-1} = X_0 U \bar{\gamma}_0.$$

Если положить $T = T_1 R$, где R обладает свойствами

$$R \gamma_k R^{-1} = \gamma_{k+1}, \quad R \bar{\gamma}_k R^{-1} = \bar{\gamma}_{k+1}, \qquad /6/$$

$$R \gamma_{n-1} R^{-1} = \gamma_0, \quad R \bar{\gamma}_{n-1} R^{-1} = \bar{\gamma}_0,$$

то для T_1 получим условия

$$T_1 \gamma_k T_1^{-1} = X_0 \gamma_k, \quad T_1 \bar{\gamma}_k T_1^{-1} = X_0 \bar{\gamma}_k, \; (k \neq 0),$$

$$T_1 \gamma_0 T^{-1} = X_0 U \gamma_0, \quad T_1 \bar{\gamma}_0 T_1^{-1} = X_0 U \bar{\gamma}_0.$$

Нетрудно показать, что эти условия выполняются, если

$$T_1 = e^{\frac{i\pi}{4} X_0 U} e^{\frac{i\pi}{4} X_0} e^{-\frac{i\pi}{4} U} = e^{\frac{i\pi}{4}} \left[\frac{1-U}{2} + \frac{1+U}{2} X_0 \right].$$

Единственность с точностью до числового множителя построенного таким путем оператора T обеспечивается известной теоремой Паули, доказанной им для матриц Дирака ($n = 2$) и справедливой при любом n. Опуская общий числовой множитель, получаем

$$T = \pi_- R + \pi_+ R_-, \quad R_- = X_0 R, \quad \pi_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm U), \qquad /7/$$

где R_- характеризуется свойствами

$$R_- \gamma_k R_-^{-1} = \gamma_{k+1}, \quad R_- \bar{\gamma}_k R_-^{-1} = \bar{\gamma}_{k+1}, \; (k \neq n-1), \qquad /8/$$

$$R_- \gamma_{n-1} R_-^{-1} = -\gamma_0, \quad R_- \bar{\gamma}_{n-1} R_-^{-1} = -\bar{\gamma}_0.$$

Отметим, что оператор трансляции в форме /7/ был получен Ньюэллом[6]. Однако в его выводе не фиксируется относительный знак двух слагаемых в формуле /7/.

Перейдем теперь к фермионным операторам. Комбинации π_+ и π_- являются проекторами на состояния с четным и нечетным числом "частиц" /фермионов/ соответственно, R_- является оператором трансляции для состояний с четным числом частиц, а R - для состояний с нечетным числом частиц. Выражение для оператора R просто найти, если перейти от операторов $\hat{c}_k$ к операторам

$$c_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k e^{-i\omega pk} \hat{c}_k, \quad \omega = \frac{2\pi}{n}. \qquad /9/$$

Как нетрудно видеть, $R c_p R^{-1} = c_p e^{i\omega p}$ и, следовательно,

$$R = e^{-i\omega \Sigma p n_p}, \quad n_p = c_p^+ c_p, \quad \sum_p n_p = \sum_k \hat{n}_k. \qquad /10/$$

Неопределенный числовой множитель, который может входить в R, мы фиксируем требованием $R|0\rangle = |0\rangle$, где $|0\rangle$ - вакуумное состояние для операторов c_p и $\hat{c}_k$. Тем самым однозначно определяется и оператор T /ортогональный и вещественный/ с помощью формулы /7/.

Аналогично выражается оператор $R_- = X_0 R$, если ввести фермионные операторы

$$c_{p+1/2} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_k e^{-i\omega(p+1/2)k} \hat{c}_k, \quad n_{p+1/2} = c^+_{p+1/2} c_{p+1/2}, \quad \Sigma n_{p+1/2} = \Sigma \hat{n}_k. \qquad /11/$$

Имеем

$$R_- c_{p+1/2} R_-^{-1} = c_{p+1/2} e^{i\omega(p+1/2)}, \quad R_- = e^{-i\omega \Sigma (p+1/2) n_{p+1/2}}. \qquad /12/$$

Неопределенный множитель в последнем равенстве находится из условия $X_0 R|0\rangle = R_-|0\rangle$. Как нетрудно видеть, $R^n = I$, $R_-^n = U$, так что оператор T, даваемый равенствами /7/, /10/ и /12/ удовлетворяет условию $T^n = I$.

Выражение для оператора трансляции $T = e^{-i\omega \hat{P}}$ определяет квазиимпульс $\hat{P} = \pi_+ P_+ + \pi_- P_-$. Это определение неоднозначно. Так, в качестве P_- вместо $\Sigma p n_p$ /в случае нечетного n/ можно использовать $\sum_1^{n-1/2} p(n_p - n_{-p})$, т.е. импульс определен по модулю n.

Существенно, что оператор квазиимпульса определяется по-разному для состояний с четным и нечетным числом фермионов, причем используются две /зависимые/ системы фермионных операторов /9/ и /11/. При решении задачи для решетки без поля это усложнение несущественно, так как в этом случае трансфер-матрица коммутирует с U и можно рассматривать состояния с $U = +1$ и $U = -1$ по отдельности*.

Матрица σ /см. /2// антикоммутирует с U и перемешивает между собой эти состояния. В случае задачи с полем приходится рассматривать матричные элементы вида $\langle P_+|\sigma|P_-\rangle$, где $|P_+\rangle$ - состояние с четным числом частиц и полным квазиимпульсом P_+, а $|P_-\rangle$ - состояние с нечетным числом частиц и квазиимпульсом P_-. Предполагается, что эти состояния заданы с помощью чисел заполнения $n_{p+1/2}$ и n_p соответственно.

В силу трансляционной инвариантности оператора σ имеем

$$\langle P_+|\sigma|P_-\rangle = n\tilde{\delta}(P_+ - P_-)\langle P_+|\gamma_0|P_-\rangle, \qquad /13/$$

где $\tilde{\delta}(P_+ - P_-)$ равна нулю, если P_+ не сравнимо с P_- по модулю n, и единице, если они сравнимы.

*Кроме того, в этом случае квазиимпульс можно определить так, чтобы он коммутировал с трансфер-матрицей. В общем случае из $[e^{-i\omega P}, M] = 0$ не следует $[P, M] = 0$.

Обратим внимание на своеобразный характер закона сохранения импульса: трансляционно-инвариантный оператор /в нашем примере σ/, меняющий четность числа фермионов, сохраняет импульс, если состояния $|P_-\rangle$ и $|P_+\rangle$ определяются с помощью разных операторов /9/ и /11/.

Отмеченное своеобразие затрудняет исследование трансфер-матрицы. Это усложнение в общем случае неизбежно, если использовать фермионные операторы. Другая сложность задачи связана с тем, что матричный элемент σ /см. /13// выражается через матричный элемент матрицы γ_0, действие которой на состояния, заданные с помощью фермионных операторов, в общем случае трудно анализировать. В этом пункте можно добиться упрощения в случае нечетного n.

3. Будем далее считать n нечетным. Определим оператор

$$U' = X_1 X_3 X_5 \ldots X_{n-2}. \qquad /14/$$

Тогда $U' R_- U' = U' X_0 R U' = UR$. Отсюда следует, что

$$STS = R, \quad S = \pi_- + U'\pi_+, \quad S^2 = I, \qquad /15/$$

т.е. оператор трансляции подобен R. Отметим, что соотношение подобия /15/ возможно только для нечетных n, в чем нетрудно убедиться, рассмотрев примеры $n = 4,6$.

Перейдем к преобразованиям трансфер-матрицы. Матрицы A и V_2, определенные формулами /2/, с помощью /4/ записываются в виде

$$A = e^{i\theta \Sigma \gamma_k \bar{\gamma}_k}, \quad V_2 = \pi_- B_- + \pi_+ B_+,$$

$$B_\mp = e^{ib[\bar{\gamma}_0 \gamma_1 + \bar{\gamma}_2 \gamma_3 + \ldots + \bar{\gamma}_{n-2} \gamma_{n-1} \pm \bar{\gamma}_n \gamma_0]}. \qquad /16/$$

Используя S из /15/, имеем

$$SAS = A, \quad SB_\mp S = e^{\pm ib[\bar{\gamma}_0 \gamma_1 + \ldots + \bar{\gamma}_n \gamma_0]}. \qquad /17/$$

Определим теперь оператор R_1:

$$R_1 \gamma_k R_1^{-1} = \gamma_{k+1}, \quad R_1 \gamma_{n-1} R_1^{-1} = \gamma_0, \quad R_1 \bar{\gamma}_k R_1^{-1} = \bar{\gamma}_k. \qquad /18/$$

Его конкретная реализация нам не понадобится. Важно лишь, что он коммутирует с U и R. Отмечая шляпкой операторы, получающиеся из /17/ после преобразования с помощью оператора R_1^{-1}, получим

$$\hat{A} = e^{i\theta\Sigma\gamma_{k-1}\bar{\gamma}_k}, \quad \hat{B}_{\mp} = e^{\mp i[\gamma_0\bar{\gamma}_0 + \ldots + \gamma_k\bar{\gamma}_k + \ldots + \gamma_n\bar{\gamma}_n]},$$

$$-i\Sigma\gamma_k\bar{\gamma}_k = 2\Sigma(\hat{n}_k - 1/2) = 2\Sigma(n_p - 1/2), \qquad /19/$$

т.е. матрицы $B_{\pm}$ становятся диагональными в представлении, задаваемом числами заполнения $\hat{n}_k$ или n_p. Упрощение вида V_2 должно сопровождаться упрощением σ, ибо $[\sigma, V_2] = 0$. В этом и заключается цель последнего преобразования. В результате получаем

$$\hat{\sigma} = R_1^{-1}S\sigma S R_1 = \pi_-(\sum_k R^k R_1^{-1}\gamma_0 U' R_1 R^{-k})\pi_+ + \text{эрм.сопр.}$$

$$\sigma = \sum_k T^k\gamma_0 T^{-k}.$$

Несложное вычисление дает: $R_1^{-1}\gamma_0 U' R_1 = \Gamma U'$, где

$$\Gamma = \gamma_0\gamma_1\gamma_2 \ldots \gamma_{n-1}, \quad [\Gamma, R] = 0. \qquad /20/$$

Предполагая для простоты, что $\frac{n-1}{2}$ равно четному числу, окончательно будем иметь

$$\hat{\sigma} = \Gamma F, \quad F = \sum_{k=0}^{n-1} R^k U' R^{-k}, \quad \Gamma^+ = \Gamma, \quad F^+ = F, \quad [\Gamma, F] = 0, \; [R, F] = 0. \qquad /21/$$

Формулы /19/ и /21/ определяют трансфер-матрицу /2/ в новом представлении. Удобство этого представления заключается в простых свойствах Γ : $\Gamma c_p \Gamma = c_{-p}^+$; действуя на вакуумное состояние, оператор Γ переводит его в полностью заполненное состояние /и наоборот/.

В силу трансляционной инвариантности трансфер-матрицу можно разбить на n блоков в зависимости от значения полного импульса $P = 0, 1 \ldots n-1 \pmod{n}$ рассматриваемых состояний. Максимальное собственное значение должно соответствовать подпространству состояний с $P = 0$. Так что можно ограничиться изучением лишь этого блока. Однако пока не удалось использовать это ограничение.

4. Полученное представление позволяет проще провести вычисление спонтанной намагниченности, следуя, в основном, работе [5].

Переходя к фермионным операторам, вместо /19/ получим /мы используем обозначения из [5] /:

$$\hat{A} = e^{-2\theta[n_0 - 1/2 + \Sigma'\cos\delta_p\tau_3(p) - \sin\delta_p\tau_2(p)]},$$

$$V_2 = \pi_- e^{2b[n_0 - 1/2 + \Sigma'\tau_3(p)]} + \pi_+ e^{-2b[n_0 - 1/2 + \Sigma'\tau_3(p)]}.$$

Трансфер-матрица при $h = 0$, $V_2^{1/2} A V_2^{1/2} = \pi_- M_- + \pi_+ M_+$, где

$$M_- = e^{(2b-2\theta)(n_0 - \frac{1}{2})} \Pi' e^{\frac{i\Phi_p}{2}\tau_1(p)} e^{\epsilon_p\tau_3(p)} e^{-\frac{i\Phi_p}{2}\tau_1(p)},$$

$$M_+ = e^{-(2b+2\theta)(n_0 - \frac{1}{2})} \Pi' e^{\frac{i\bar{\Phi}_p}{2}\tau_1(p)} e^{-\bar{\epsilon}_p\tau_3(p)} e^{-\frac{i\bar{\Phi}_p}{2}\tau_1(p)}. \qquad /22/$$

Здесь $\Phi_p = \Phi(z_p)$ и $\epsilon_p = \epsilon(z_p)$ определяются формулами /13/ и /14/ из [5], а $\bar{\Phi}_p = \Phi(-z_p)$, $\bar{\epsilon}_p = \epsilon(-z_p)$, $z_p = e^{i2\pi p/n}$. Нетрудно видеть, что собственными векторами матриц M_- и M_+, соответствующими небольшим собственным значениям, будут

$$|\psi_-\rangle = \Pi'_q e^{\frac{i\Phi_q}{2}\tau_q} |n_p = 1\rangle, \quad |\psi_+\rangle = \Pi' e^{\frac{i\bar{\Phi}_p}{2}\tau_p} |0\rangle.$$

Абсолютная величина спонтанной намагниченности будет равна

$$\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}|\langle\psi_+|\Gamma F|\psi_-\rangle| = \lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}|\langle 0|\Pi'_p e^{-\frac{i\bar{\Phi}_p}{2}\tau_p} F \Pi'_q e^{\frac{i\Phi_q}{2}\tau_q}|0\rangle| =$$

$$= \lim_{n\to\infty} |\langle 0|\Pi'_p e^{-\frac{i\bar{\Phi}_p}{2}\bar{\tau}_p}\Pi'_q e^{\frac{i\Phi_q}{2}\tau_q}|0\rangle|, \qquad /23/$$

где $\bar{\tau}_1 = U'\tau_1 U'$. На первом шаге преобразования мы воспользовались тем, что Γ коммутирует с $\tau_1 = c_p c_{-p} + c_{-p}^+ c_p^+$, и тем, что Γ переводит полностью заполненное состояние в вакуум. На втором шаге использовалась трансляционная инвариантность оператора F.

Следует отметить, что упрощения, связанные с использованием выражения /23/, носят чисто технический характер. Возможно, что для существенного продвижения в решении задачи с полем следует использовать другую трансфер-матрицу, а именно трансфер-матрицу для диагоналей [7,8,9]. Для этой матрицы нет удобного явного выражения в виде произведения матриц, аналогичного /2/, но она обладает замечательным свойством коммутативности:

$$[M(a, b), M(a', b')] = 0, \quad (h = 0)$$

при определенной связи между параметрами a, b и a', b'. Это свойство существенно используется при решении задачи для $h = 0$ /см. [8] /. Однако оно не является необходимым условием для разрешимости задачи. Нетрудно показать, что для обычной трансфер-матрицы /2/ при $h = 0$ условие коммутативности не выполняется.

Автор благодарен В.И.Огиевецкому и М.И.Широкову за обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lee T.D., Yang C.N. Phys.Rev., 1952, 87, p.410.
2. Kaufmann B. Phys.Rev., 1949, 76, p.1232.
3. Shultz T.D., Mattis D.C., Lieb E.H. Rev.Mod.Phys., 1964, 36, p.856.
4. Yang C.N. Phys.Rev., 1952, 85, p.808.
5. Валуев Б.Н. ТМФ, 1983, 56, с.251.
6. Newell G.F. Phys.Rev., 1950, 78, p.444.
7. Onsager L. In: Critical Phenomena in Alloys, Magnets and Superconductors. (Ed. by R.E.Mills, E.Ascher, R.I.Jaffee). Mc Graw-Hill, New York, 1971.
8. Baxter R.J. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. Academic Press, London, 1982.
9. Stephen M.J., Mittag L. Journ.Math.Phys., 1972, 13, p.1944.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 ноября 1984 года.

Валуев Б.Н. P17-84-763

О трансфер-матрице для решетки Изинга в магнитном поле

Рассматривается столбцовая трансфер-матрица для решетки Изинга /с размерами $n \times m$/ в магнитном поле. Получено выражение для оператора трансляции через фермионные операторы. Отмечено, что оператор трансляции и трансфер-матрицу в случае нечетного n можно преобразовать к более простому виду. Это преобразование облегчает вычисление спонтанной намагниченности.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Valuev B.N. P17-84-763

On Transfer Matrix For Ising Lattice in Magnetic Field

Columnar transfer matrix for Ising lattice in magnetic field is considered (lattice has dimensions $n \times m$). Expression for translation operator in terms of fermion operators is obtained. It is noticed that translation operator and transfer matrix may be transformed to a simpler form when n is odd. This transformation facilitates the calculation of spontaneous magnetization.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984