ЖЭТФ, 1997, том 111, вып. 5, стр. 1717–1731

ОБОБЩЕННЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ЙОРДАНА–ВИГНЕРА И ПРОБЛЕМА ИЗИНГА–ОНЗАГЕРА

М. С. Кохманьский

Institute of Physics, Pedagogical University
35-310, Rzeszów, Poland

Поступила в редакцию 6 марта 1996 г.,
после переработки 26 июля 1996 г.

Приводится еще один из возможных способов получения решения Онзагера для $2D$-модели Изинга. Предлагаемый метод в отличие от ранее известных позволяет рассмотреть задачу в слабом внешнем магнитном поле. Используются обобщенные преобразования типа Йордана–Вигнера в форме, введенной в работе автора [1].

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известны различные методы решения двумерной модели Изинга в отсутствие внешнего магнитного поля (см., например, [2–6] и списки литературы в этих работах). К сожалению, практически ни один из этих подходов не привел к успеху в решении проблемы Изинга–Онзагера во внешнем магнитном поле или к решению трехмерной модели Изинга. Точнее говоря, все эти методы не давали возможности продвинуться далее в решении проблемы Изинга–Онзагера, несмотря на большие усилия со стороны физиков и математиков.

Следует особо отметить работу Шульца, Маттиса и Либа [7], которая, по мнению автора, является одной из красивейших и изящных работ в этой области теоретической физики (еще один пример глубокой связи теоретической физики с искусством), посвященных проблеме Изинга–Онзагера. Метод, использованный в работе [7], основан на применении трансфер-матрицы и последующем переходе к фермиевскому представлению посредством одномерных преобразований Йордана–Вигнера [8]. С другой стороны, имеется ряд работ [9–11], где в той или иной форме применяются комбинаторные методы вычисления статистической суммы для $2D$-модели Изинга с использованием графического представления для исходной суммы. Автор прекрасно осознает и «помнит», что к настоящему времени уже накоплено великое множество подходов и методик для решения трехмерной задачи, которые, тем не менее, ни к чему не привели. Однако, как хорошо известно, большинство из этих подходов и методик (см., например, [12]) носит ограниченный характер, что даже не позволяет рассмотреть задачу в слабом внешнем магнитном поле для случая двух измерений, не говоря уже о трехмерной задаче.

В данной работе развивается еще один из возможных подходов к проблеме Изинга–Онзагера, и в качестве примера приводится решение для $2D$-модели Изинга, использующее при этом идеи как работы [7], так и работ [9–11]. Идея заключается в том, чтобы сформулировать задачу в трех измерениях в представлении вторичного квантования, а потом перейти по одной из постоянных взаимодействия $J_{1,2,3}$ к нулю. При этом мы дополнительно используем обобщенные преобразования типа Йордана–Вигнера в форме, введенной в [1]. Мы надеемся, что предлагаемый подход позволит существенно продвинуться в решении проблемы Изинга–Онзагера во внешнем магнитном поле, о чем несколько подробнее будет сказано в заключении.

2. СТАТИСТИЧЕСКАЯ СУММА

2.1. Аналитическое представление

Рассмотрим простую кубическую решетку, составленную из N строк, M столбцов и K плоскостей (слоев), в узлах которой заданы «спины» σ_{nmk}, принимающие два значения: $\sigma_{nmk} = \pm 1$. Гамильтониан для $3D$-модели Изинга с взаимодействием ближайших соседей задается в виде

$$\mathscr{H} = -\sum_{n,m,k=1}^{NMK} \left(J_1 \sigma_{nmk}\sigma_{n+1,mk} + J_2 \sigma_{nmk}\sigma_{n,m+1,k} + J_3 \sigma_{nmk}\sigma_{nm,k+1} \right), \tag{2.1}$$

где совокупный индекс nmk нумерует узлы простой кубической решетки $N \times M \times K$, а постоянные $J_j > 0$ учитывают анизотропию взаимодействия изинговских спинов. На переменные σ_{nmk} накладываются, как обычно, периодические граничные условия. Статистическую сумму системы Z_3 запишем в виде

$$Z_3 = \sum_{\sigma_{111}=\pm1} \dots \sum_{\sigma_{NMK}=\pm1} e^{-\beta\mathscr{H}} =$$

$$= \sum_{\{\sigma_{nmk}=\pm1\}} \exp\left[\sum_{nmk} (K_1 \sigma_{nmk}\sigma_{n+1,mk} + K_2 \sigma_{nmk}\sigma_{n,m+1,k} + K_3 \sigma_{nmk}\sigma_{nm,k+1}) \right], \tag{2.2}$$

где величины K_i определяются как (T — температура)

$$K_{1,2,3} = \beta J_{1,2,3}, \qquad \beta = 1/k_B T. \tag{2.3}$$

(Здесь и везде ниже суммирование по nmk (или nm), а также произведение по nm будет означать суммирование или произведение по полному набору целых чисел от 1 до N, M и K по каждому из индексов соответственно.)

Используя хорошо известный метод трансфер-матрицы [4, 5], для статистической суммы Z_3 (2.2) можно записать выражение

$$Z_3 = \mathrm{Tr}(T)^K, \tag{2.4}$$

где T — трансфер-матрица, матричные элементы которой определяются равенствами

$$T^{\{\sigma_{nmk}\}}_{\{\sigma_{nm,k+1}\}} = \exp\left[\sum_{nm} (K_1 \sigma_{n+1,mk} + K_2 \sigma_{n,m+1,k}) \sigma_{nmk} \right] \exp\left[K_3 \sum_{nm} \sigma_{nmk}\sigma_{nm,k+1} \right]. \tag{2.5}$$

Матричные элементы трансфер-матрицы слой–слой модели Изинга можно записать и в несколько иной форме [4], но все эти представления фактически эквивалентны. Согласно выражению (2.5), матрицу T можно представить в виде произведения матриц $T_{1,2,3}$ той же размерности ($2^{NM} \times 2^{NM}$):

$$T = T_3 T_2 T_1, \tag{2.6}$$

матрицы T_1, T_2 и T_3 определяются выражениями [4]

$$T_1 = \exp\left(K_1 \sum_{nm} \tau^z_{nm}\tau^z_{n+1,m}\right), \quad T_2 = \exp\left(K_2 \sum_{nm} \tau^z_{nm}\tau^z_{n,m+1}\right), \tag{2.7}$$

$$T_3 = (2\,\mathrm{sh}\,2K_3)^{NM/2} \exp\left(K_3^* \sum_{nm} \tau^x_{nm}\right), \tag{2.8}$$

где $\tau^{x,y,z}_{nm}$ — три набора 2^{NM}-мерных матриц вида

$$\tau^{x,y,z}_{nm} = 1 \otimes 1 \otimes \ldots \otimes \tau^{x,y,z} \otimes \ldots \otimes 1 \otimes 1, \tag{2.9}$$

здесь матрицы Паули $\tau^{x,y,z}$ стоят в этих произведениях на nm-ом месте. В формуле (2.8) величины K_3 и K_3^* связаны между собой соотношениями вида

$$\mathrm{th}(K_3) = \exp(-2K_3^*) \text{ или } \quad \mathrm{sh}(2K_3)\,\mathrm{sh}(2K_3^*) = 1. \tag{2.10}$$

Спиновые матрицы Паули $\tau^{x,y,z}_{nm}$ (2.9) коммутируют между собой при разных $nm \neq \neq n'm'$, в то время как для данного значения nm эти матрицы удовлетворяют стандартным свойствам [4]. Легко видеть, что матрицы $T_{1,2}$ (2.7) коммутируют между собой, но не коммутируют с матрицей T_3 (2.8). Переходу к $2D$-модели Изинга по постоянным взаимодействия K_1 или K_2 соответствует положение $K_1 = 0$ или $K_2 = 0$ и снятие суммирования по n ($N = 1$) или по m ($M = 1$) соответственно. При этом мы получаем стандартные выражения [5, 7] для $2D$-модели Изинга, причем оператор T_1 (2.7) тождественно равен единичному $T_1 \equiv 1$ в первом случае и $T_2 \equiv 1$ во втором случае.

Несколько иная ситуация получается при переходе к $2D$-модели Изинга по постоянной взаимодействия K_3. В этом случае мы должны положить $K_3 = 0$, $K = 1$, т.е. снять суммирование по k, в результате чего для оператора T_3 (2.8) нетрудно получить выражение

$$T_3^* \equiv T_3(K_3 = 0) = \prod_{nm}(1 + \tau^x_{nm}), \tag{2.11}$$

где мы использовали соотношения (2.10). Именно такая структура оператора T_3^* позволяет в конечном счете наметить несколько иной путь решения задачи Изинга, а также существенно продвинуться в решении проблемы Изинга–Онзагера во внешнем магнитном поле H. Таким образом, в этом случае для статистической суммы $2D$-модели Изинга, согласно (2.4), можем записать выражение

$$Z_2 = \mathrm{Tr}(T_3^* T_2 T_1), \tag{2.12}$$

где матрицы $T_{1,2}$ определяются формулами (2.7), а матрица T_3^* — формулой (2.11). Преимущество представления статистической суммы в виде (2.12), как представляется автору, является в каком-то смысле очевидным, о чем дополнительно будет сказано ниже.

Шульц, Маттис и Либ [7] показали, что T-матрицу в ее стандартном представлении можно выразить через ферми-операторы вторичного квантования. При этом они использовали известные преобразования Йордана–Вигнера [8], позволяющие выразить для одномерной системы фермиевские операторы c_m^+, c_m через операторы Паули $\tau_m^\pm$ [5]:

$$c_m = \exp\left(i\pi \sum_{j=1}^{m-1} \tau_j^+ \tau_j^-\right)\tau_m^-, \quad c_m^+ = \exp\left(i\pi \sum_{j=1}^{m-1} \tau_j^+ \tau_j^-\right)\tau_m^+. \tag{2.13}$$

В работе [1] введены преобразования типа Йордана–Вигнера (2.13), обобщенные на дву-, три- и d-мерные системы, в форме удобной для применения к решеточным системам. Вводя, как и в одномерном случае [5], двухиндексовые операторы Паули

$$\tau_{nm}^\pm = \frac{1}{2}(\tau_{nm}^z \pm i\tau_{nm}^y), \tag{2.14}$$

которые удовлетворяют перестановочным соотношениям антикоммутации для одного узла и коммутации для разных узлов, матрицы $T_{1,2}$ и T_3^* запишем в виде

$$T_1 = \exp\left[K_1 \sum_{nm} (\tau_{nm}^+ + \tau_{nm}^-)(\tau_{n+1,m}^+ + \tau_{n+1,m}^-)\right], \tag{2.15}$$

$$T_2 = \exp\left[K_2 \sum_{nm} (\tau_{nm}^+ + \tau_{nm}^-)(\tau_{n,m+1}^+ + \tau_{n,m+1}^-)\right], \tag{2.16}$$

$$T_3^* = \prod_{nm} \left[1 + (1 - 2\tau_{nm}^+ \tau_{nm}^-)\right]. \tag{2.17}$$

Как уже отмечалось выше, операторы Паули $\tau_{nm}^\pm$ ведут себя как фермиевские операторы для одного узла и как бозе-операторы для разных узлов. Далее, используя двумерные преобразования типа Йордана–Вигнера [1]

$$\begin{aligned} \alpha_{nm}^+ &= \exp\left(i\pi \sum_{k=1}^{n-1}\sum_{l=1}^{M} \tau_{kl}^+\tau_{kl}^- + i\pi \sum_{l=1}^{m-1} \tau_{nl}^+\tau_{nl}^-\right)\tau_{nm}^+, \\ \alpha_{nm} &= \exp\left(i\pi \sum_{k=1}^{n-1}\sum_{l=1}^{M} \tau_{kl}^+\tau_{kl}^- + i\pi \sum_{l=1}^{m-1} \tau_{nl}^+\tau_{nl}^-\right)\tau_{nm}^-, \end{aligned} \tag{2.18}$$

$$\begin{aligned} \beta_{nm}^+ &= \exp\left(i\pi \sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{m-1} \tau_{kl}^+\tau_{kl}^- + i\pi \sum_{k=1}^{n-1} \tau_{km}^+\tau_{km}^-\right)\tau_{nm}^+, \\ \beta_{nm} &= \exp\left(i\pi \sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{m-1} \tau_{kl}^+\tau_{kl}^- + i\pi \sum_{k=1}^{n-1} \tau_{km}^+\tau_{km}^-\right)\tau_{nm}^-, \end{aligned} \tag{2.19}$$

после ряда преобразований [13] представим операторы (2.14)–(2.16) в виде

$$\begin{aligned} T_1 = \exp\Bigg\{K_1 \sum_{m=1}^{M} \times \\ \times \left[\sum_{n=1}^{N-1} (\beta_{nm}^+ - \beta_{nm})(\beta_{n+1,m}^+ + \beta_{n+1,m}) - \hat{g}_m(\beta_{Nm}^+ - \beta_{Nm})(\beta_{1,m}^+ + \beta_{1,m})\right]\Bigg\}, \end{aligned} \tag{2.20}$$

$$T_2 = \exp\left\{K_2 \sum_{n=1}^{N} \times \right.$$

$$\left. \times \left[\sum_{m=1}^{M-1} (\alpha^+_{nm} - \alpha_{nm})(\alpha^+_{n,m+1} + \alpha_{n,m+1}) - \hat{g}_n(\alpha^+_{nM} - \alpha_{nM})(\alpha^+_{n,1} + \alpha_{n,1})\right]\right\}, \quad (2.21)$$

$$T_3^* = \prod_{nm}\left[1 + (-1)^{\alpha^+_{nm}\alpha_{nm}}\right] = \prod_{nm}\left[1 + (-1)^{\beta^+_{nm}\beta_{nm}}\right], \quad (2.22)$$

где

$$\hat{g}_n \equiv (-1)^{\hat{M}_n}, \quad \hat{M}_n = \sum_{m=1}^{M} \alpha^+_{nm}\alpha_{nm}, \qquad \hat{g}_m \equiv (-1)^{\hat{N}_m}, \quad \hat{N}_m = \sum_{n=1}^{N} \beta^+_{nm}\beta_{nm}.$$

Перестановочные соотношения между α- и β-операторами имеют вид [1]

$$\{\alpha^+_{nm}, \beta_{nm}\}_+ = \{\beta^+_{nm}, \alpha_{nm}\}_+ = (-1)^{\varphi_{nm}},$$

$$[\alpha_{nm}, \beta_{n'm'}]_- = \ldots = [\alpha^+_{nm}, \beta^+_{n'm'}]_- = 0, \qquad \begin{pmatrix} n' \le n-1, & m' \ge m+1 \\ n' \ge n+1, & m' \le m-1 \end{pmatrix},$$

$$\{\alpha_{nm}, \beta_{n'm'}\}_+ = \ldots = \{\alpha^+_{nm}, \beta^+_{n'm'}\}_+ = 0, \quad (2.23)$$

во всех остальных случаях, когда операторы определяются как

$$\alpha^+_{nm} = \exp(i\pi\varphi_{nm})\beta^+_{nm}, \qquad \alpha_{nm} = \exp(i\pi\varphi_{nm})\beta_{nm},$$

$$\varphi_{nm} = \left[\sum_{k=n+1}^{N} \sum_{p=1}^{m-1} + \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{p=m+1}^{M}\right] \alpha^+_{kp}\alpha_{kp} = [\cdots]\beta^+_{kp}\beta_{kp}, \quad (2.24)$$

причем $\alpha^+_{nm}\alpha_{nm} = \beta^+_{nm}\beta_{nm}$, операторы φ_{nm}, очевидно, коммутируют с операторами $\alpha^+_{nm}, \alpha_{nm}$ и β^+_{nm}, β_{nm}, т.е.

$$[\varphi_{nm}, \alpha^+_{nm}]_- = \ldots = \ldots = [\varphi_{nm}, \beta_{nm}]_- = 0.$$

Вводя, как и в одномерном случае [7], базис в представлении чисел заполнения для α- и β-фермионов (2^{NM}-мерное пространство в представлении Фока [14]), а затем вычисляя соответствующие матричные элементы $\langle l|T|l\rangle$, легко видеть, что благодаря мультипликативному характеру оператора T_3^* (2.22) все матричные элементы, за исключением вакуумного матричного элемента $\langle 0|T|0\rangle$, равны нулю. Для вакуумного матричного элемента вклад от оператора T_3^* равен просто 2^{NM}, и мы для Z_2 (2.12) можем записать следующее выражение в представлении вторичного квантования:

$$Z_2 = 2^{NM}\langle 0|(T_2T_1)|0\rangle, \quad (2.25)$$

где вакуумное состояние $|0\rangle$ определяется стандартным образом:

$$\alpha_{nm}|0\rangle = \beta_{nm}|0\rangle = 0, \quad n = 1, 2, ..., N, \quad m = 1, 2, \dots M, \tag{2.26}$$

а операторы $T_{1,2}$ определяются формулами (2.20)–(2.21). Отметим здесь особо, что вакуумные состояния (2.26) для α- и β-фермионов могут отличаться друг от друга самое большее на постоянный фазовый множитель, который в данном случае всегда можно выбрать равным единице. Наконец, легко показать, что в случае граничных условий для α- и β-операторов типа «свободных концов» ($\alpha^+_{n,M+1} = 0$ и т. д.) выражение (2.25) для статистической суммы Z_2 можно представить окончательно в виде

$$Z_2 = 2^{NM}[(1 - z_1^2)(1 - z_2^2)]^{-NM/2}\langle 0|T_2^* T_1^*|0\rangle, \tag{2.27}$$

$$z_1 = \operatorname{th}(K_1), \quad z_2 = \operatorname{th}(K_2),$$

где операторы $T^*_{1,2}$ имеют следующий вид:

$$T_1^* = \exp\left\{\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{M}\sum_{l=1}^{N-n} z_1^l \beta^+_{nm}\beta^+_{n+l,m}\right\}, \tag{2.28}$$

$$T_2^* = \exp\left\{\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{M}\sum_{k=1}^{M-m} z_2^k \alpha_{n,m+k}\alpha_{nm}\right\}. \tag{2.29}$$

При получении выражения (2.27) мы «пропустили» все операторы рождения α^+_{nm} через бра-вектор $\langle 0|$ и все операторы уничтожения β_{nm} через кет-вектор $|0\rangle$, используя равенства $\langle 0|\alpha^+_{nm} = 0, \quad \beta_{nm}|0\rangle = 0$, для всех n, m.

2.2. Графическое представление

Обозначим вакуумный матричный элемент в формуле (2.27) для Z_2 через S, а произведение операторов $T_2^* T_1^*$ через G, т. е.

$$S \equiv \langle 0|T_2^* T_1^*|0\rangle \equiv \langle 0|G|0\rangle. \tag{2.30}$$

Таким образом, нам необходимо вычислить вакуумный матричный элемент S (2.30) от суммы произведений фермиевских операторов рождения и уничтожения. Оператор G, входящий в (2.30), является полиномом по переменным z_1, z_2, α_{nm} и β^+_{nm}. Поскольку G входит в (2.30) в обкладках $\langle 0|G|0\rangle$, то не все члены полинома дадут отличный от нуля вклад в матричный элемент S. Расписывая произведение G и подставляя в (2.30), величину S можно представить в виде суммы вакуумных матричных элементов $\sum_\nu S_\nu$, где S_ν — вакуумный матричный элемент от ν-го члена полинома G. Как следует из (2.28), (2.29), каждый член полинома G представляет собой произведение различных пар $z_2^k\alpha_{n,m+k}\alpha_{nm}$ и $z_1^l\beta^+_{nm}\beta^+_{n+l,m}$, которые мы ниже будем условно называть α-парами и β-парами. Очевидно, что все члены полинома G с неравным числом α- и β-пар дают нулевой вклад и не все члены полинома G с равным числом α- и β-пар будут давать ненулевой вклад в S. Действительно, ненулевой вклад в S будут давать только те члены полинома G с равным числом α- и β-пар, в которых каждый оператор уничтожения α_{nm} спаривается с соответствующим оператором рождения $\beta^+_{n'm'}$ при одинаковых индексах ($n = n'$, $m = m'$). В противном случае такой член будет давать нулевой вклад в S.

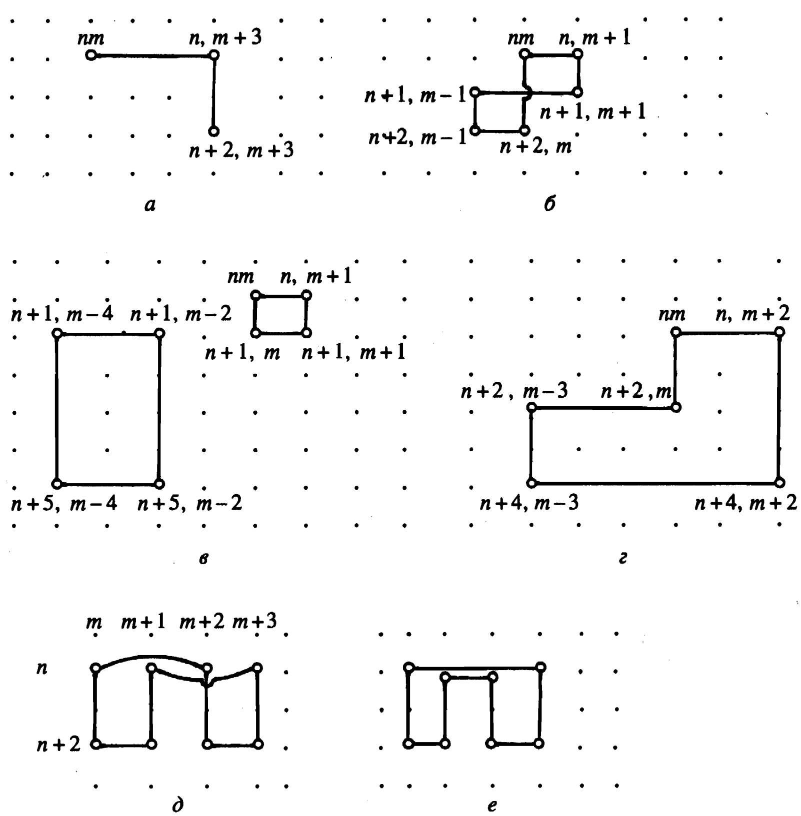

Рис. 1. Гамильтоновские циклы на простой квадратной решетке $N \times M$ с переменной длиной шага: *а* — пример гамильтоновской цепи; *б* — пример простой петли с пересечением горизонтальной и вертикальной связей (ребер); *в, г* — примеры простых петель без самопересечений связей; *д, е* — простые петли с пересечением двух наложенных горизонтальных или двух наложенных вертикальных связей

Таким образом, мы приходим к диаграммному представлению, замечая, что каждому вакуумному матричному элементу S_ν, можно однозначно поставить в соответствие совокупность линий (связей), соединяющих некоторые пары узлов решетки. Так, например, графикам на рис. 1*а–г* соответствуют следующие матричные элементы:

$$
\begin{aligned}
&а)\ z_1^2 z_2^3\langle 0|\alpha_{n,m+3}\alpha_{nm}\beta^+_{n,m+3}\beta^+_{n+2,m+3}|0\rangle,\\
&б)\ z_1^4 z_2^4\langle 0|\alpha_{n,m+1}\alpha_{nm}\alpha_{n+1,m+1}\alpha_{n+1,m-1}\alpha_{n+2,m}\alpha_{n+2,m-1}\times\\
&\quad\times\beta^+_{n+1,m-1}\beta^+_{n+2,m-1}\beta^+_{nm}\beta^+_{n+2,m}\beta^+_{n,m+1}\beta^+_{n+1,m+1}|0\rangle,\\
&в)\ z_1^{10} z_2^6\langle 0|\alpha_{n,m+1}\alpha_{nm}\alpha_{n+1,m+1}\alpha_{n+1,m}\alpha_{n+1,m-2}\alpha_{n+1,m-4}\alpha_{n+5,m-2}\alpha_{n+5,m-4}\times\\
&\quad\times\beta^+_{n+1,m-4}\beta^+_{n+5,m-4}\beta^+_{n+1,m-2}\beta^+_{n+5,m-2}\beta^+_{nm}\beta^+_{n+1,m}\beta^+_{n,m+1}\beta^+_{n+1,m+1}|0\rangle,\\
&г)\ z_1^8 z_2^{10}\langle 0|\alpha_{n,m+2}\alpha_{nm}\alpha_{n+2,m}\alpha_{n+2,m-3}\alpha_{n+4,m+2}\alpha_{n+4,m-3}\times\\
&\quad\times\beta^+_{n+2,m-3}\beta^+_{n+4,m-3}\beta^+_{nm}\beta^+_{n+2,m}\beta^+_{n,m+2}\beta^+_{n+4,m+2}|0\rangle\,.
\end{aligned}
\qquad (2.31)
$$

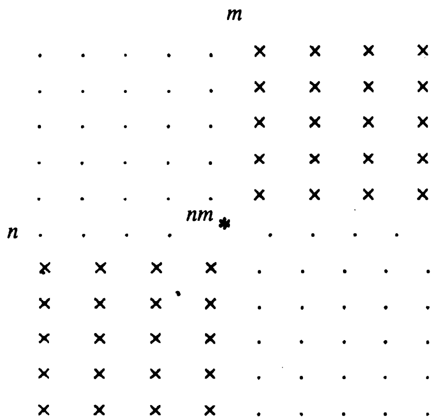

Рис. 2. «Геометрия» перестановочных соотношений для α- и β-операторов: $*$ — α-оператор, $\times$ — β-оператор

Как показывают выражения (2.28), (2.29) и (2.31), каждой горизонтальной линии «длиной» k сопоставляется множитель z_2^k, а каждой вертикальной линии «длиной» l — множитель z_1^l. Выше было показано, что ненулевой вклад в S дают лишь такие матричные элементы S_ν, которые содержат равное число α- и β-пар, причем каждый оператор уничтожения α_{nm} спаривается с соответствующим оператором рождения β_{nm}^+. Геометрически это означает, что из всей совокупности возможных графиков отличный от нуля вклад в S дают лишь те, у которых в каждой вершине графа встречаются под «прямым углом» нуль или две линии (связи). Иначе говоря, не допускаются графы, в какой-либо вершине которого встречаются две горизонтальные линии (связи) или две вертикальные связи. Простейшие примеры таких графиков изображены на рис. 1*а–д*. Таким образом, все графики, дающие ненулевой вклад в S, должны быть замкнутыми, причем ни в каком узле не допускаются самопересечения линий (связей), поскольку $\alpha_{nm}^2 = (\beta_{nm}^+)^2 = 0$. С точки зрения теории графов, описанным выше замкнутым графам соответствуют неориентированные циклы Гамильтона (с валентностью вершин $\delta = 0, 2$) на простой прямоугольной решетке [15–17].

Таким образом, вакуумный матричный элемент S (2.30) может быть представлен в виде

$$S = \sum_\nu S_\nu, \tag{2.32}$$

причем при подсчете всякий многосвязный график считается за один (например, график на рис. 1*в*). Каждый замкнутый график дает вклад

$$(\pm 1) \prod_{j=1}^{s} z_1^{l_j} z_2^{k_j}, \tag{2.33}$$

где s — число горизонтальных связей, равное числу вертикальных связей. Далее, используя связь между α- и β-операторами (2.23) и теорему Вика [18], можно показать, что произвольный вакуумный матричный элемент, дающий ненулевой вклад в сумму S (2.31), разбивается на произведение матричных элементов, соответствующих связным частям графика (которые ниже для краткости мы будем называть простыми петлями без

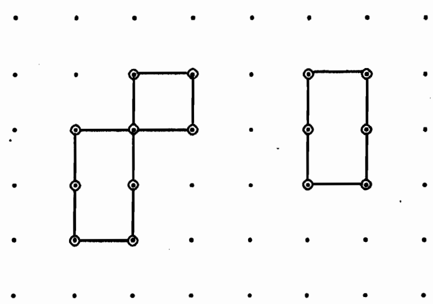

Рис. 3. Простой пример графа (циклы Эйлера), дающий вклад в статистическую сумму $Z(z_1, z_2)$

самопересечений в узлах решетки). Непосредственно можно проверить, учитывая перестановочные соотношения (2.23) между α- и β-операторами, что, например, графики на рис. 1*б–е* входят со знаком плюс. Другие графики могут входить и со знаком минус, например, график на рис. 1*д*. Перестановочные соотношения между α- и β-операторами (2.23) очень наглядно иллюстрируются на рис. 2, где выделенный оператор α_{nm} $(*)$ для фиксированного узла (nm) коммутирует с β-операторами в узлах $(n'm')$, помеченных крестом $(\times)$. Для всех остальных узлов α- и β-операторы антикоммутируют между собой. Таким образом, вклад от каждого графика разбивается на произведение вкладов от простых петель, причем вклад простой петли с s горизонтальными и s вертикальными связями равен

$$\Pi_s = (\pm 1) \prod_{j=1}^{s} z_1^{l_j} z_2^{k_j} . \tag{2.34}$$

Для S (2.32) мы теперь можем записать выражение

$$S = 1 + \sum_{\{s\}} \Pi_s + \sum_{\{s\},\{q\}} \Pi_s \Pi_q + \ldots \equiv \Gamma^{(h)}(z_1, z_2,) , \tag{2.35}$$

где петля Π_s определяется выражением (2.34). В выражение (2.35) кроме суммирования по числу связей s входит еще суммирование по всем допустимым длинам этих связей $\{k\}$ и $\{l\}$ при фиксированном s. Легко видеть, что суммирование в (2.35) по длинам горизонтальных $\{k\}$ и вертикальных $\{l\}$ связей проводится независимым образом. В теории графов [15, 16] функцию (2.35) принято называть производящей функцией, что мы и отметили выше, вводя для нее обозначение $\Gamma^{(h)}(z_1, z_2)$, где верхний индекс (h) указывает на принадлежность к циклам Гамильтона. Задача, таким образом, сводится к суммированию по всем циклам Гамильтона с шагом (ребром) переменной длины на прямоугольной решетке описанного выше типа.

Отметим здесь, что графическое представление для Z_2, описанное нами выше, весьма близко напоминает диаграммное представление для статистической суммы $2D$-модели Изинга в нулевом магнитном поле ($h = 0$) (см., например, [11, 15, 19]). В этом случае, как известно [11, 19], статистическая сумма представляется в виде

$$Z(K_1, K_2) = (2 \operatorname{ch} K_1 \operatorname{ch} K_2)^{NM} \sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha,\beta} \operatorname{th}^{\alpha} K_1 \operatorname{th}^{\beta} K_2 , \tag{2.36}$$

где $g_{\alpha,\beta}$ — число замкнутых графиков, составленных из β горизонтальных и α вертикальных связей, причем эти связи соединяют ближайшие узлы квадратной решетки, так что каждой α-связи сопоставляется множитель (вес) $\operatorname{th} K_1$, а β-связи — множитель $\operatorname{th} K_2$. При этом в некоторых вершинах графа возможно однократное самопересечение, т. е. в одной вершине графа встречаются нуль, две или четыре линии, что соответствует неориентированным циклам Эйлера степени $\delta \leq 4$ [15, 17]. На рис. 3 показан один из простейших графиков, дающих вклад в сумму (2.36) для $Z_2(K_1, K_2)$. Существенное отличие от случая, описанного нами выше, заключается именно в этом последнем обстоятельстве, поскольку в нашем случае в одной вершине могут встречаться только нуль или две линии (горизонтальная и вертикальная). Это соответствует, как уже сказано выше, неориентированным циклам Гамильтона на квадратной решетке [15, 17]. Другое отличие заключается в том, что α- и β-связи в (2.35) могут соединять не только ближайшие узлы решетки, что проявляется в зависимости весовых множителей $z_1^{l_j}$ и $z_2^{k_j}$ от расстояний l и k между узлами решетки в вертикальном и горизонтальном направлениях соответственно. Как уже отмечалось выше, в терминологии теории графов [15] задача вычисления суммы (2.35) — это задача суммирования по гамильтоновским циклам (простым циклам) на прямоугольной решетке с $N \times M$ узлами с переменной «длиной» ребра в горизонтальном и вертикальном направлениях. В то же время задача вычисления суммы (2.36) — это задача суммирования по всем возможным циклам Эйлера описанного выше типа ($\delta \leq 4$) на той же решетке. Как известно [15], имеется тесная связь между графами Эйлера и Гамильтона, причем для некоторого типа графов Эйлера можно перейти к графам Гамильтона, но не наоборот. В работах [20, 21] приведен ряд примеров нетривиальной связи между производящими функциями для циклов Эйлера и Гамильтона на простой прямоугольной решетке. В работе [21] путем сравнения было показано, что производящая функция $\Gamma^{(h)}(z_1, z_2)$ для циклов Гамильтона, описанных выше, в точности равна производящей функции $\Gamma^{(e)}(z_1, z_2)$ для циклов Эйлера ($\delta \leq 4$) $2D$-модели Изинга [15], и поэтому имеет место равенство

$$\Gamma^{(h)}(z_1, z_2) =$$
$$= \prod_{n,m=0}^{N,M} \left[(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right) - 2z_2(1 - z_1^2) \cos\left(\frac{2\pi m}{M}\right) \right]^{1/2}, \quad (2.37)$$

где $z_{1,2} \equiv \operatorname{th} K_{1,2}$. Ниже мы непосредственно вычислим сумму (2.35) и покажем, что имеет место равенство (2.37), а здесь только отметим, что в работе [20] приведен ряд примеров вычисления производящих функций для циклов Гамильтона с весами, отличными от рассмотренных выше.

3. РЕШЕНИЕ

Решение Каца и Уорда [9], превосходное изложение которого можно найти в работе [22], содержит известное топологическое рассуждение. Именно, если при обходе произвольного замкнутого графика (здесь речь идет об эйлеровских графах на решетке) каждому повороту налево приписать вес $\alpha = \exp(i\pi/4)$, а повороту направо — вес $\alpha^{-1} = \exp(-i\pi/4)$, то замкнутые диаграммы (т. е. те, которые мы хотим учесть) будут учтены, а запрещенные диаграммы будут компенсированы, если мы пройдем различными путями по этим диаграммам. Полное доказательство этой теоремы было дано Шерманом [23]. Аналогичное утверждение имеет место и в случае гамильтоновских графов на решетке с шагом переменной длины, описанных нами выше, что для простых случаев будет показано ниже. Однако мы в своих рассуждениях будем следовать работам [11, 24].

Прежде всего напомним, что некоторые гамильтоновские петли (например, рис. 1*д*) входят со знаком минус в выражение (2.35) для S. Именно, непосредственной проверкой с использованием перестановочных соотношений (2.23), можно убедиться, что каждая «двойная перекрестная связь» типа изображенной на рис. 1*д* вносит знак минус в суммарный знак простой петли (2.34) для всех допустимых диаграмм. То же относится и к вертикальным «двойным перекрестным связям». В то же время каждая «простая двойная связь» типа показанной на рис. 1*е* вносит знак плюс в суммарный знак простой петли (2.34). Все остальные простые петли без «двойных связей» типа представленных на рис. 1*б–г* входят в сумму (2.35) для S со знаком плюс. (Заметим здесь мимоходом, что каждому эйлеровскому графу на решетке можно поставить во взаимно однозначное соответствие гамильтоновский граф с шагом переменной длины без «двойных связей», причем этот гамильтоновский граф может состоять из одной, двух и более простых петель. Для этого необходимо в эйлеровском графе «вычеркнуть» все промежуточные вершины, вместе с вершинами самопересечения горизонтальных и вертикальных ребер эйлеровского графа.)

Теперь легко понять, что если в выражении (2.35) для S все простые петли (2.34) брать со знаком плюс, а каждому повороту налево (направо) при обходе простой петли приписать вес $\alpha = \exp(i\pi/4)$ ($\alpha^{-1} = \exp(-i\pi/4)$), то задача вычисления суммы S (2.35) фактически сводится к задаче о «случайных блужданиях» точки по решетке с шагом переменной длины [11, 22, 24]. Действительно, при таком способе обхода простых петель все петли с «двойными связями» компенсируются (например, петли на рис. 1*д, е*), как и должно быть. Таким способом можно пройти все петли с «двойными связями» и убедиться, что их полный вклад будет компенсироваться. Далее, легко убедиться на ряде конкретных примеров, пользуясь рассуждениями аналогичными проведенным в [11, 22, 24], что если мы пройдем различными путями по всем петлям гамильтоновского типа с шагом переменной длины без «двойных связей» (приписывая им соответствующие веса α и α^{-1} при повороте налево и направо соответственно), то все разрешенные диаграммы будут учтены, а запрещенные будут компенсированы. При этом следует особо подчеркнуть, что такая полная компенсация запрещенных диаграмм в любом порядке будет иметь место только в случае факторизованных весов (z_1^l, z_2^k), приписываемых шагам с длиной l и k соответственно. В работе [20] показано, что включение внешнего магнитного поля H приводит к перенормировке весов z_1^l, z_2^k на $a(l)$ и $b(k)$, где $a(l)$ и $b(k)$ — известные функции параметров взаимодействия $K_{1,2}$ и внешнего поля $h = \beta\mu H$, а также целых положительных чисел l и k. Для этого случая указанная выше полная компенсация запрещенных диаграмм не имеет места.

Возвращаясь к нашей задаче и следуя теперь рассуждениям работ [11, 24], для величины S (2.35) можем записать выражение

$$S = \exp\left[-\sum_{r=1}^{\infty} f_r\right], \tag{3.1}$$

где f_r — сумма по всем одиночным простым петлям длиной $r = 2s$, т. е. состоящим из s горизонтальных и s вертикальных связей. При этом каждая горизонтальная связь входит с весом $z_2^k e^{i\varphi/2}$, а каждая вертикальная связь — с весом $z_1^l e^{i\varphi/2}$, где угол $\varphi =$

$= \pm\pi/2$ — изменение направления при переходе к следующей связи. Вводя величину $W_r(n,m,\nu)$ — сумму по всем возможным переходам с числом связей $r = s_1 + s_2$ из некоторого начального узла (n_0, m_0, ν_0) в узел (n,m,ν), где ν — дополнительный индекс, связанный с четырьмя возможными направлениями $(1,2,3,4)$ на простой квадратной решетке, для f_r запишем выражение

$$f_r = \frac{1}{2r} \sum_{n_0,m_0,\nu_0} W_r(n_0,m_0,\nu_0). \tag{3.2}$$

Для величины $W_r(n,m,\nu)$ легко получить следующие рекуррентные соотношения ($\alpha \equiv \equiv \exp(i\pi/4)$):

$$\begin{aligned}
W_{r+1}(n,m,1) &= 0 + \alpha^{-1}\sum_{l=1}^{N} z_1^l W_r(n-l,m,2) + 0 + \alpha\sum_{l=1}^{N} z_1^l W_r(n+l,m,4),\\
W_{r+1}(n,m,2) &= \alpha\sum_{k=1}^{M} z_2^k W_r(n,m-k,1) + 0 + \alpha^{-1}\sum_{k=1}^{M} z_2^k W_r(n,m+k,3) + 0,\\
W_{r+1}(n,m,3) &= 0 + \alpha\sum_{l=1}^{N} z_1^l W_r(n-l,m,2) + 0 + \alpha^{-1}\sum_{l=1}^{N} z_1^l W_r(n+l,m,4),\\
W_{r+1}(n,m,4) &= \alpha^{-1}\sum_{k=1}^{M} z_2^k W_r(n,m-k,1) + 0 + \alpha\sum_{k=1}^{M} z_2^k W_r(n,m+k,3) + 0.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Смысл рекуррентных соотношений (3.3) вполне очевиден. Так, в узел $(n,m,1)$ можно попасть из узлов $(n',m,2)$ и $(n'',m,4)$, т. е. сверху и снизу (за направление 1 мы выбрали направление «вправо»), где $n' = n - l$, $n'' = n + l$ и l пробегает, строго говоря, значения от 1 до $N - 1$. Однако при больших N суммирование по l можно распространить до N, что мы и сделали в выражениях (3.3), поскольку в термодинамическом пределе эти граничные эффекты исчезают. В структуре рекуррентных соотношений (3.3) хорошо проявляется гамильтоновский характер простых петель, что следует сравнить со случаем эйлеровских графов [22, 24]. Записывая теперь рекуррентные соотношения (3.3) в матричном представлении

$$W_{r+1}(n,m,\nu) = \sum_{n',m',\nu'} \Lambda(n,m,\nu|n',m',\nu')W_r(n',m',\nu'), \tag{3.4}$$

легко видеть [24], что имеет место представление

$$\operatorname{Tr}\Lambda^r = \sum_{n_0,m_0,\nu_0} W_r(n_0,m_0,\nu_0), \tag{3.5}$$

а также

$$f_r = \frac{1}{2r}\operatorname{Tr}\Lambda^r = \frac{1}{2r}\sum_i \lambda_i^r. \tag{3.6}$$

Учитывая (3.2) и (3.6), для S (3.1) можем записать теперь следующее выражение:

$$S = \prod \sqrt{1 - \lambda_i}, \tag{3.7}$$

где λ_i — собственные значения матрицы $\Lambda(n, m, \nu)$, $i = 1, 2, ..., 4NM$. Матрицу $\Lambda(n, m, \nu)$ легко диагонализовать относительно индексов n, m путем перехода к другому представлению с помощью преобразования Фурье:

$$W_r(n, m, \nu) = \sum_{q,p=0}^{N,M} \exp\left(\frac{2\pi i}{N} nq + \frac{2\pi i}{M} mp\right) W_r(q, p, \nu). \tag{3.8}$$

Подставляя (3.8) в (3.3), при фиксированных q, p будем иметь

$$\Lambda(q, p, \nu | q, p, \nu') = \begin{bmatrix} 0 & \alpha^{-1} \sum\limits_{l=1}^{N} z_1^l \varepsilon^{-lq} & 0 & \alpha \sum\limits_{l=1}^{N} z_1^l \varepsilon^{lq} \\ \alpha \sum\limits_{k=1}^{M} z_2^k \omega^{-kp} & 0 & \alpha^{-1} \sum\limits_{k=1}^{M} z_2^k \omega^{kp} & 0 \\ 0 & \alpha \sum\limits_{l=1}^{N} z_1^l \varepsilon^{-lq} & 0 & \alpha^{-1} \sum\limits_{l=1}^{N} z_1^l \varepsilon^{lq} \\ \alpha^{-1} \sum\limits_{k=1}^{M} z_2^k \omega^{-kp} & 0 & \alpha \sum\limits_{k=1}^{M} z_2^k \omega^{kp} & 0 \end{bmatrix}, \tag{3.9}$$

где $\alpha \equiv \exp(i\pi/4)$, $\varepsilon \equiv \exp(2\pi i/N)$, $\omega \equiv \exp(2\pi i/M)$.

Очевидно, что при фиксированных q, p нам достаточно вычислить определитель матрицы 4×4:

$$\prod_{j=1}^{4} (1 - \lambda_j) = \mathrm{Det}(\delta_{\nu\nu'} - \Lambda_{\nu\nu'}) \equiv A(q, p), \tag{3.10}$$

и после несложных вычислений для $A(q, p)$ (3.10) получим следующее выражение:

$$A(q, p) = \frac{(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2)\cos(2\pi q/N) - 2z_2(1 - z_1^2)\cos(2\pi p/M)}{\left[1 - 2z_1 \cos(2\pi q/N) + z_1^2\right]\left[1 - 2z_2 \cos(2\pi p/M) + z_2^2\right]}. \tag{3.11}$$

При получении выражения (3.11) мы опустили слагаемые пропорциональные z_1^N и z_2^M, поскольку при асимптотически больших N и M имеем $z_1^N \approx 0$ и $z_2^M \approx 0$ при $z_{1,2} < 1$. Окончательно при асимптотически больших N, M для S (3.7) с учетом (3.11) получим следующее выражение:

$$S = \prod_i \sqrt{1 - \lambda_i} = \prod_{q,p=0}^{N,M} A^{1/2}(q, p) =$$

$$= \prod_{q,p=0}^{N,M} \left[\frac{(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2)\cos(2\pi q/N) - 2z_2(1 - z_1^2)\cos(2\pi p/M)}{\left[1 - 2z_1 \cos(2\pi q/N) + z_1^2\right]\left[1 - 2z_2 \cos(2\pi p/M) + z_2^2\right]}\right]^{1/2}. \tag{3.12}$$

Очевидно, что при асимптотически больших N, M выражение (3.12) переходит в выражение (2.37), поскольку имеют место равенства

$$\prod_{q=0}^{N}\left(1-2z_1\cos\frac{2\pi q}{N}+z_1^2\right)=1,\quad \prod_{p=0}^{M}\left(1-2z_2\cos\frac{2\pi p}{N}+z_2^2\right)=1$$

при $N, M \to \infty$, $z_{1,2} < 1$. Наконец, учитывая (2.30) и подставляя (3.12) в формулу (2.27), для свободной энергии f на один изинговский спин в термодинамическом пределе получим хорошо известное решение Онзагера:

$$-\beta f = \lim_{N,M\to\infty}\frac{1}{NM}\ln Z_2 =$$

$$= \ln 2 + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi} d\varphi_1 d\varphi_2 \ln\left[\operatorname{ch}(2K_1)\operatorname{ch}(2K_2) - \operatorname{sh}(2K_1)\cos\varphi_1 - \operatorname{sh}(2K_2)\cos\varphi_2\right], \quad (3.13)$$

где $\beta = 1/k_B T$ — обратная температура.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный в данной работе метод получения решения Онзагера, несмотря на свою сравнительную громоздкость, позволяет аналитически рассмотреть проблему Изинга–Онзагера во внешнем магнитном поле для ряда предельных случаев как в двумерном, так и в трехмерном случаях. Предложенное решение в своей последней части все-таки отличается от классического решения Шермана–Вдовиченко, которое сводится к суммированию по замкнутым графам. Существенное отличие заключается в том, что в нашем случае суммирование ведется по гамильтоновским замкнутым графам, тогда как в случае решения Шермана–Вдовиченко суммирование ведется по эйлеровским замкнутым графам. Именно это обстоятельство (совместно с представлением статистической суммы в виде (2.25)) позволяет эффективно учесть внешнее магнитное поле. В работах автора [13, 20] на основе предложенного подхода показано, как можно максимально упростить оператор, отвечающий взаимодействию изинговских спинов с внешним магнитным полем, в представлении вторичного квантования. Это в свою очередь позволяет эффективно перенормировать постоянные взаимодействия $K_{1,2}$ с учетом внешнего магнитного поля H. Такая перенормировка возможна именно благодаря представлению статистической суммы в виде (2.25). Поэтому, по мнению автора, представленный в работе формализм и решение $2D$-задачи Изинга имеют не только самостоятельный интерес, но и позволяют надеяться на существенное продвижение в решении проблемы Изинга–Онзагера. Можно применить эти результаты к анализу термодинамики изинговского магнетика во внешнем магнитном поле. Отметим, что автору пока не удалось провести полного доказательства аналога топологической теоремы Каца–Уорда [22], как это было сделано Шерманом [23] для случая эйлеровских графов на простой квадратной решетке.

Автор выражает глубокую благодарность профессору Яну Мостовскому за его вопросы и сомнения, а также необыкновенную терпеливость, с которой он выслушивал мои «короткие» рассказы о проблеме Изинга–Онзагера. Это в значительной мере помогло автору глубже понять суть и трудности рассматриваемой проблемы.

Литература

1. M. S. Kochmański, J. Tech. Phys. **36**, 485 (1995).
2. B. McCoy and T. T. Wu, *Two Dimensional Ising Models*, Harvard Univ. Press. Cambridge (1973).
3. J. M. Ziman, *Models of Disorder*, Univ. Press, Cambridge (1979).
4. R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academ. Press, New York (1982).
5. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, Москва (1987).
6. C. J. Thompson, *Classical Equilibrium Statistical Mechanics*, Clarendon Press, Oxford (1988).
7. T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb, Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964).
8. P. Jordan and E. Wigner, Z. Phys. **47**, 631 (1928).
9. M. Kac and J. C. Ward, Phys. Rev. **88**, 1332 (1952).
10. P. W. Kasteleyn, J. Math. Phys. **4**, 287 (1963).
11. Н. В. Вдовиченко, ЖЭТФ **47**, 715 (1964).
12. R. J. Baxter and I. G. Enting, J. Phys. A **11**, 2463 (1978).
13. M. S. Kochmański, submitted to Phys. Rev. E.
14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
15. *Graph Theory and Theoretical Physics*, ed. by F. Harary, Academ. Press., New York (1967).
16. F. Harary and E. M. Palmer, *Graphical Enumeration*, Academ. Press, New York (1973).
17. W. T. Tutte, *Graph Theory*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1984).
18. G. C. Wick, Phys. Rev. **80**, 268 (1950).
19. C. A. Hurst and H. S. Green, J. Chem. Phys. **33**, 1059 (1961).
20. M. S. Kochmański, J. Tech. Phys. **37**, 67 (1996).
21. M. S. Kochmański, submitted to Ann. Polon. Math. (1996).
22. R. P. Feynman, *Statistical Mechanics*, W. A. Benjamin, Inc., Ad. Book Progr. Reading, Massachusetts (1972).
23. S. Sherman, J. Math. Phys. **1**, 202 (1960); **4**, 1213 (1963).
24. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).