1954 г. Июнь *Т. LIII, вып. 2*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

ТЕРМОДИНАМИКА ПЛОСКОЙ ДИПОЛЬНОЙ РЕШЁТКИ

Ю. Б. Румер

ВВЕДЕНИЕ

Применение методов статистической механики к системам, способным совершать фазовые переходы второго рода, встречает серьёзные математические трудности. Для того чтобы усмотреть причину возникающих трудностей, напомним коротко, в чём заключается основное различие между фазовыми переходами первого и второго рода.

В случае переходов первого рода, протекающих с выделением тепла, по обе стороны точки перехода существуют метастабильные, термодинамически неустойчивые состояния. Поэтому во всём диапазоне изменения температуры система может быть описана двумя термодинамическими потенциалами $\Phi_A(p, T)$, $\Phi_B(p, T)$; ниже точки перехода $\Phi_A < \Phi_B$, выше точки перехода $\Phi_A > \Phi_B$. Отсюда следует, что точка перехода $T = T_0$, в которой $\Phi_A(p, T_0) = \Phi_B(p, T_0)$, является в математическом смысле обычной точкой для термодинамических потенциалов, и функции $\Phi_A(p, T)$ и $\Phi_B(p, T)$ не должны в ней иметь особенность.

Иначе обстоит дело в случае фазового перехода второго рода, протекающего без выделения тепла. Здесь не существует в термодинамическом смысле метастабильных состояний; хотя переохлаждённые состояния частичного равновесия, связанные с большим различием времён релаксации, и могут существовать. ?

Хорошо известными точками перехода второго рода являются точки Кюри у ферромагнетиков, точка перехода жидкого гелия в сверхтекучее состояние и точка перехода металлического проводника в сверхпроводящее состояние.

Равновесная система описывается во всём диапазоне изменения температуры одним термодинамическим потенциалом $\Phi(p, T)$, имеющим в точке перехода непрерывную производную. Переход обнаруживается в наличии разрывов в высших производных (например, в скачке теплоёмкости или в скачке производной теплоёмкости по температуре). Отсюда следует, что точка фазового перехода второго рода является в математическом смысле особой точкой термодинамического потенциала.

В этом и лежит причина возникающих математических трудностей. Как известно, любые приближённые представления аналитической функции делаются неприменимыми в окрестности особой точки. Поэтому для описания системы вблизи точки перехода второго рода мы вынуждены пользоваться лишь точными выражениями для термодинамических функций и не можем применять приближённых методов. Это обстоятельство крайне суживает класс систем, для которых теоретическое рассмотрение может быть проведено до конца.

Общая теория фазовых переходов второго рода была дана Л. Д. Ландау [1]. В его теории система описывается термодинамическим потенциалом $\Phi(p, T, \xi)$, зависящим от трёх переменных. Дополнительная переменная ξ имеет в первой фазе значение нуль, а во второй фазе — отличные от нуля положительные или отрицательные значения.

Переменная ξ в известном смысле не равноправна с переменными p, T; в то время как давление и температура могут быть заданы произвольно, реально осуществляющееся значение ξ само должно быть определено из условия теплового равновесия, т. е. из условия минимальности Φ при заданных p и T.

Основное предположение теории Ландау заключается в том, что вблизи точки фазового перехода второго рода, где ξ принимает сколь угодно малое значение, функция $\Phi(p, T, \xi)$ может быть разложена в род по степеням ξ.

Однако, как подчёркивает сам Л. Д. Ландау, возможность такого разложения отнюдь не очевидна. Более того, поскольку, как уже указывалось, точка перехода второго рода должна быть некоторой особой точкой термодинамического потенциала, есть все основания ожидать, что такое разложение не может быть произведено вплоть до членов произвольного порядка, а коэффициенты разложения могут иметь особенности как функции от p и T.

Полное выяснение характера особенности термодинамического потенциала в точке перехода связано с большими трудностями.

Поэтому представляет значительный интерес рассмотрение специальных моделей, допускающих фазовые переходы второго рода, исследование которых можно провести до конца. Единственной такой моделью, известной в настоящее время, является специальная модель плоской дипольной решётки, подробно рассмотренная в работе Онсагера [2] и ряде примыкающих к ней работ.

Применяя новую оригинальную методику, основанную на широком применении матричного исчисления, Онсагеру удалось вычислить точную функцию распределения для рассмотренной модели во всём диапазоне изменения температуры и исследовать характер особенности термодинамических функций в точке перехода.

Первоначальная методика Онсагера основана на применении очень сложных и специальных алгебраических методов, что делает её мало доступной физикам. Значительный прогресс мы находим в работе Кауфман[3]. В этой работе цель достигается путём привлечения теории спиноров в многомерных пространствах, также мало доступной физикам.

Цель настоящего обзора заключается в том, чтобы изложить весь материал по возможности элементарно и сделать его доступным более широкому кругу физиков-теоретиков.

К сожалению, излагаемая здесь методика, которая в случае плоской решётки решает задачу до конца, не обобщается непосредственно на случай трёхмерной решётки. Следует, однако, думать, что дальнейший прогресс не исключён и что исследования в этой области могут стать обещающими.

Мы использовали появившийся недавно обзор[4], от содержания которого наша статья существенно отличается выбором и изложением материала.

Нам придётся иметь дело с понятиями прямой суммы $\hat{A} \dot{+} \hat{B}$ и прямого произведения $\hat{A} \times \hat{B}$ двух матриц. Краткие сведения об этих операциях читатель найдёт в приложении, более полные, — например, в[5].

Мы вынесли в приложение также задачу о разложении любого вращения в $2n$-мерном комплексном пространстве на последовательные плоские коммутирующие вращения в n взаимно перпендикулярных плоскостях.

§ 1. МАТРИЦА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ $\hat{P}$

Рассмотрим плоскую двухмерную квадратичную решётку, состоящую из m столбцов, на каждом из которых размещено по n узлов. Мы будем говорить о решётке, составленной из m столбцов и n строк. Наложим на решётку условие цикличности, замкнув её в обоих направлениях, т. е. отождествим $(m+1)$-й столбец с первым столбцом и $(n+1)$-ю строку с первой строкой.

В каждом из узлов решётки поместим по диполю с осями, направленными перпендикулярно к плоскости решётки. Каждый из диполей может иметь одну из двух возможных взаимно противоположных ориентаций. Очевидно, что общее число возможных конфигураций диполей в решётке равно 2^{nm}.

Для описания различных конфигураций поступим следующим образом. Припишем каждому диполю дискретную переменную σ, способную принимать лишь два значения: $\sigma = +1$, если диполь ориентирован направо, и $\sigma = -1$, если диполь ориентирован налево.

Далее введём m функций ν_k от n дискретных переменных $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n$

$$\nu_k = \nu_k(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n). \tag{1,1}$$

Каждая из функций ν_k способна принимать 2^n дискретных значений и каждое из них может быть использовано для нумерации конфигураций диполей на k-м столбце. Введём, наконец, функцию C от m переменных $\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_m$

$$C = C(\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_m). \tag{1,2}$$

Очевидно, что функция C способна принимать 2^{nm} дискретных значений, каждое из которых может быть использовано для нумерации конфигураций диполей в решётке.

Для термодинамического описания решётки мы должны вычислить функцию распределения:

$$Z(T) = \sum_{(C)} \exp(-E(C)/kT), \tag{1,3}$$

где $E(C)$ — зависящая от конфигурации диполей энергия их взаимодействия, T — абсолютная температура и сумма распространена по всем 2^{nm} возможным конфигурациям диполей в решётке. Очевидно, что выражение для $Z(T)$ может быть переписано в виде

$$Z(T) = \sum_{\nu_1} \sum_{\nu_2} \ldots \sum_{\nu_m} \exp[-E(\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_m)/kT], \tag{1,4}$$

где каждое из суммирований ведётся по всем 2^n возможным конфигурациям диполей в соответствующих столбцах.

Если ограничиться только учётом энергии взаимодействия между ближайшими соседями и пренебречь взаимодействием между более отдалёнными диполями, то конфигурационная энергия $E(\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_m)$ может быть представлена в виде

$$E(\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_m) = \sum_{k=}^{k=m} \{V_1(\nu_k) + V_2(\nu_k, \nu_{\ } +)\}, \tag{1,5}$$

где $V_1(\nu_k)$ — энергия взаимодействия диполей, расположенных на k-м столбце, и $V_2(\nu_k, \nu_{k+1})$ — энергия взаимодействия между диполями двух соседних столбцов. Тогда $Z(T)$ представится в виде

$$Z(T) = \sum_{(\nu_1)} \sum_{(\nu_2)} \ldots \sum_{(\nu_m)} \prod_{k=1}^{k=n} \exp\left\{\frac{-V_1(\nu_k)}{kT}\right\} \exp\left\{\frac{-V_2(\nu_k, \nu_{k+1})}{kT}\right\}. \tag{1,6}$$

Если теперь ввести две 2^n-рядные матрицы $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ (из которых $\hat{P}_1$ диагональная) с элементами:

$$\left.\begin{aligned}(\nu|\hat{P}_1|\nu) &= \exp\{-V_1(\nu)/kT\},\\ (\nu|\hat{P}_2|\nu') &= \exp\{-V_2(\nu,\nu')/kT\}\end{aligned}\right\} \tag{1,7}$$

и принять во внимание формулу матричного исчисления

$$\mathrm{Sp}\hat{A}^m = \sum_{(n_1)}\sum_{(n_2)} \ldots \sum_{(n_m)} A_{n_1 n_2} A_{n_2 n_3} \ldots A_{n_m n_1}, \tag{1,8}$$

то функция распределения может быть записана в виде

$$Z(T) = \mathrm{Sp}(\hat{P}_1 \hat{P}_2)^m. \tag{1,9}$$

Если вычислить все 2^n собственных значения матрицы

$$\hat{P} = \hat{P}_1 \hat{P}_2,$$

которые обозначим через $E(\nu)$, то функция распределения запишется в виде

$$Z(T) = \sum_{(\nu)} (E(\nu))^m. \tag{1,10}$$

Для дальнейших вычислений необходимо записать энергию взаимодействия $V_1(\nu)$ и $V_2(\nu, \nu')$ в явном виде. Для этого обозначим через I_1' и I_2' — энергии взаимодействия двух соседних диполей с одинаковой и различной ориентациями в одном и том же столбце. Рассмотрим функцию

$$V'(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = \frac{I_1' + I_2'}{2} + \frac{I_1' - I_2'}{2}\sigma_k \sigma_{k+1}, \tag{1,11}$$

способную принимать только два значения: I_1', если оба диполя ориентированы одинаково, и I_2', если они ориентированы различно.

Для функции $V_1(\nu)$, выражающей энергию взаимодействия диполей в одном и том же столбце, имеем:

$$V_1(\nu) = \sum_{k=1}^{k=n} V'(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = \frac{n(I_1' + I_2')}{2} + \frac{I_1' - I_2'}{2}\sum_{k=1}^{k=n}\sigma_k \sigma_{k+1}. \tag{1,12}$$

Далее, обозначим через I_1 и I_2 энергии взиимодействия двух соседних диполей с одинаковой и различной ориентациями в одной и той же строке. Функция

$$V(\sigma_k, \sigma_k') = \frac{I_1 + I_2}{2} + \frac{I_1 - I_2}{2}\sigma_k \sigma_k' \tag{1,13}$$

способна принимать только два значения: I_1, если оба соседних диполя ориентированы одинаково, и I_2, если они ориентированы различно.

Для функции $V_2(\nu, \nu')$, выражающей энергию взаимодействия диполей двух соседних столбцов, имеем:

$$V_2(\nu, \nu') = \sum_{k=1}^{k=n} V(\sigma_k, \sigma'_k) = \frac{n(I_1+I_2)}{2} + \frac{I_1 - I_2}{2}\sum_{k=1}^{k=n}\sigma_k\sigma'_k. \tag{1,14}$$

Мы получим для матричных элементов матриц $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ по формулам (1,7) выражения:

$$\left.\begin{aligned} (\nu|\hat{P}_1|\nu) &= \exp n\theta'_0 \prod_{k=1}^{u=n} \exp(\theta'\sigma_k\sigma_{k+1}), \\ (\nu|\hat{P}_2|\nu') &= \exp n\theta_0 \prod_{k=1}^{k=n} \exp(\theta\sigma_u\sigma'_u), \end{aligned}\right\} \tag{1,15}$$

где для сокращения мы ввели следующие обозначения:

$$\left.\begin{aligned} -\theta'_0 &= (I'_1 + I'_2)/2kT; \quad & \theta' &= (I'_2 - I'_1)/2kT, \\ -\theta_0 &= (I_1 + I_2)/2kT; \quad & \theta &= (I_2 - I_1)/2kT. \end{aligned}\right\} \tag{1,16}$$

Наша задача состоит теперь в том, чтобы выразить обе 2^n-рядные матрицы $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ с элементами (1,15) через систему более простых 2^n-рядных матриц. Поступим следующим образом. Будем рассматривать функцию $\varphi(\sigma)$ от одной дискретной переменной σ как дву компонентную величину

$$\varphi = \{\varphi(+1), \quad \varphi(-1)\}.$$

Три матрицы Паули:

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{b} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{c} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \tag{1,17}$$

действуя на $\varphi(\sigma)$, дают:

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}\begin{pmatrix} \varphi^{(+1)} \\ \varphi^{(-1)} \end{pmatrix} &= \{\varphi^{(+1)}, \ -\varphi^{(-1)}\}, \\ \hat{b}\begin{pmatrix} \varphi^{(+1)} \\ \varphi^{(-1)} \end{pmatrix} &= \{\varphi^{(-1)}, \ \varphi^{(+1)}\}, \\ \hat{c}\begin{pmatrix} \varphi^{(+1)} \\ \varphi^{(-1)} \end{pmatrix} &= \{-i\varphi^{(-1)}, \ i\varphi^{(+1)}\}. \end{aligned}\right\} \tag{1,18}$$

Формулы (1,18) могут быть кратко записаны в виде:

$$\hat{a}\varphi(\sigma) = \sigma\,\varphi(\sigma); \quad \hat{b}\varphi(\sigma) = \varphi(-\sigma); \quad \hat{c}\varphi(\sigma) = i\sigma\varphi(-\sigma). \quad (1,18')$$

Введём теперь систему (2^n-рядных) матриц

$$\left.\begin{matrix} \hat{A}_1, & \hat{A}_2, \ldots, & \hat{A}_n, \\ \hat{B}_1, & \hat{B}_2, \ldots, & \hat{B}_n, \\ \hat{C}_1, & \hat{C}_2, \ldots, & \hat{C}_n, \end{matrix}\right\} \qquad (1,19)$$

действующих на функцию φ от n дискретных переменных $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_{n-1}, \sigma_n$. Будем рассматривать функцию φ как 2^n-компонентную величину с составляющими вида

$$\varphi(\pm 1, \pm 1, \ldots, \pm 1).$$

Определим матрицы $\hat{A}_k$, $\hat{B}_k$, $\hat{C}_k$ как операторы, выполняющие следующие действия над функцией $\varphi(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n)$:

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}_k\varphi(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_k, \ldots, \sigma_n) &= \sigma_k\varphi(\sigma_1\sigma_2\ldots\sigma_k\ldots\sigma_n), \\ \hat{B}_k\varphi(\sigma_1, \ldots, \sigma_k, \ldots, \sigma_n) &= \varphi(\sigma_1\ldots(-\sigma_k)\ldots\sigma_n), \\ \hat{C}_k\varphi(\sigma_1, \ldots, \sigma_k, \ldots, \sigma_n) &= i\sigma_k\varphi(\sigma_1\ldots(-\sigma_k)\ldots\sigma_n). \end{aligned}\right\} \qquad (1,20)$$

Принимая во внимание (1,18′), легко видеть, что матрицы $\hat{A}_k$, $\hat{B}_k$, $\hat{C}_k$ могут быть записаны как прямые произведения следующих матриц:

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}_k &= \hat{\varepsilon}\times\hat{\varepsilon}\times\ldots\times\hat{a}\times\hat{\varepsilon}\times\ldots\times\hat{\varepsilon}, \\ \hat{B}_k &= \hat{\varepsilon}\times\hat{\varepsilon}\times\ldots\times\hat{b}\times\hat{\varepsilon}\times\ldots\times\hat{\varepsilon}, \\ \hat{C}_k &= \hat{\varepsilon}\times\hat{\varepsilon}\times\ldots\times\hat{c}\times\hat{\varepsilon}\times\ldots\times\hat{\varepsilon}, \end{aligned}\right\} \qquad (1,21)$$

где через $\hat{\varepsilon}$ обозначена единичная двухрядная матрица и матрицы $\hat{a}$, $\hat{b}$, $\hat{c}$ стоят во всех произведениях (1,21) на месте k-го сомножителя.

Из определений (1,21) следует, что все матрицы $\hat{A}_k$, $\hat{B}_k$, $\hat{C}_k$ при различных индексах перестановочны друг с другом, а при одинаковых индексах связаны между собой так же, как и матрицы Паули, формулами

$$\hat{A}_k\hat{B}_k = i\hat{C}_k; \quad \hat{B}_k\hat{C}_k = i\hat{A}_k; \quad \hat{C}_k\hat{A}_k = i\hat{B}_k. \qquad (1,22)$$

Выразим теперь матрицы $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ через матрицы $\hat{A}_k$, $\hat{B}_k$, $\hat{C}_k$.

Матрица $\hat{P}_1$ диагональная. Поэтому, поскольку из (1,20) следует для любой функции $f(\hat{A}_k\hat{A}_{k+1})$

$$f(\hat{A}_k\hat{A}_{k+1})\,\varphi(\sigma_1\ldots\sigma_n)=f(\sigma_k\sigma_{n+1})\,\varphi(\sigma_1\ldots\sigma_n), \tag{1,23}$$

мы можем её сразу представить в виде:

$$\hat{P}_1=\exp n\theta_0'\prod_{k=1}^{k=n}\exp(\theta'\hat{A}_k\hat{A}_{k+1}). \tag{1,24}$$

Матрица $\hat{P}_2$ не диагональная и может быть представлена как произведение числа $\exp(n\theta_0)$ на прямое произведение из n двухрядных матриц:

$$\hat{P}_2=\exp n\theta_0\begin{pmatrix}e^{\theta} & e^{-\theta}\\ e^{-\theta} & e^{\theta}\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}e^{\theta} & e^{-\theta}\\ e^{-\theta} & e^{\theta}\end{pmatrix}\times\ldots\times\begin{pmatrix}e^{\theta} & e^{-\theta}\\ e^{-\theta} & e^{\theta}\end{pmatrix}=$$

$$=\exp n\theta_0\,(\hat{\varepsilon}e^{\theta}+\hat{b}e^{-\theta})\times(\hat{\varepsilon}e^{\theta}+\hat{b}e^{-\theta})\times\ldots\times(\hat{\varepsilon}e^{\theta}+\hat{b}e^{-\theta}). \tag{1,25}$$

Воспользовавшись формулой (1,21), мы получаем для $\hat{P}_2$ выражение

$$\hat{P}_2=\exp n\theta_0\prod_{k=1}^{k=n}(e^{\theta}+\hat{B}_k e^{-\theta}). \tag{1,26}$$

Очевидно, что в силу (1,22) матрицы $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ не перестановочны.

Поскольку, однако, след произведения двух матриц $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ не зависит от порядка сомножителей, при вычислении функции распределения $Z(T)=\mathrm{Sp}\,(\hat{P}_1\hat{P}_2)^m$, порядок сомножителей не имеет значения.

Итак, мы получили для матрицы распределения выражение

$$\hat{P}=\exp\left(n\theta_0'+n\,\theta_0\right)\prod_{k=1}^{k=n}\exp(\theta'\hat{A}_k\hat{A}_{k+1})\prod_{k=1}^{k=n}(e^{\theta}+\hat{B}_k e^{-\theta}). \tag{1,27}$$

Отметим, что наличие у функции распределения множителя вида $\exp(C/kT)$ несущественно и он может быть отброшен.

В самом деле, в силу $E=kT^2\frac{d\ln Z}{dT}$ наличие такого множителя обозначает добавление к энергии E системы несущественной аддитивной постоянной C. Поэтому в дальнейшем мы всюду в матрице распределения опускаем множитель $\exp\left(n\theta_0'+n\theta_0\right)$

и пишем её в виде

$$\hat{P} = \prod_{k=1}^{k=n} \exp(\theta' \hat{A}_k \hat{A}_{k+1}) \prod_{k=1}^{k=n} (e^{\theta} + \hat{B}_k e^{-\theta}). \quad (1,27')$$

Произведём ещё одно формальное преобразование выражения (1,26) для матрицы $\hat{P}_2$.

Положим:

$$e^{\theta} = \rho \operatorname{ch} \theta^*; \quad e^{-\theta} = \rho \operatorname{sh} \theta^*, \quad (1,28)$$

откуда найдём:

$$\rho = \sqrt{2 \operatorname{sh} 2\theta}; \quad \operatorname{th} \theta^* = e^{-2\theta}; \quad \theta^* = \frac{1}{2} \ln \operatorname{cth} 2\theta. \quad (1,29)$$

Поскольку $B_k^2 = 1$, имеем:

$$e^{\theta} + B_k e^{-\theta} = \rho (\operatorname{ch} \theta^* + \hat{B}_k \operatorname{sh} \theta^*) = \sqrt{2 \operatorname{sh} 2\theta} \exp(\theta^* \hat{B}_k) \quad (1,30)$$

и, следовательно, окончательно

$$\hat{P}_2 = (2 \operatorname{sh} 2\theta)^{n/2} \prod_{k=1}^{k=n} \exp(\theta^* \hat{B}_k). \quad (1,31)$$

Окончательное выражение для матрицы $\hat{P} = \hat{P}_1 \hat{P}_2$ имеет вид:

$$\hat{P} = \hat{P}_1 \hat{P}_2 = (2 \operatorname{sh} 2\theta)^{n/2} \prod_{k=1}^{k=n} \exp(\theta' \hat{A}_k \hat{A}_{k+1}) \prod_{k=1}^{k=n} \exp(\theta^* \hat{B}_k). \quad (1,32)$$

В заключение выведем несколько формул, связывающих θ и θ^*, которые окажутся полезными в дальнейшем.

По формулам (1,28) находим:

$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{2} (\operatorname{cth} \theta^* - \operatorname{th} \theta^*) &= \frac{1}{\operatorname{sh} 2\theta^*} = \operatorname{sh} 2\theta, \\ \frac{1}{2} (\operatorname{cth} \theta^* + \operatorname{th} \theta^*) &= \frac{\operatorname{ch} 2\theta^*}{\operatorname{sh} 2\theta^*} = \operatorname{ch} 2\theta \end{aligned}\right\} \quad (1,33)$$

и получаем важные для последующего соотношения:

$$\left.\begin{aligned} \operatorname{sh} 2\theta^* \operatorname{sh} 2\theta &= 1, \\ \operatorname{ch} 2\theta^* \operatorname{sh} 2\theta &= \operatorname{ch} 2\theta. \end{aligned}\right\} \quad (1,34)$$

При изменении температуры в интервале $0 < T < \infty$ величины θ' и θ^* монотонно изменяются, причём $\theta' = \frac{I_2' - I_1'}{2kT}$ монотонно падает от ∞ до 0, а величина $\theta^* = \frac{1}{2} \ln \operatorname{cth} \frac{I_2 - I_1}{kT}$ монотонно растёт от 0 до ∞. Существует, следовательно, некоторая температура $T = T_0$, при которой $\theta^* = \theta'$. При этой температуре согласно (1,34)

$$\operatorname{sh} 2\theta' \operatorname{sh} 2\theta = 1. \tag{1,35}$$

Мы дальше увидим, что температура T_0 и есть температура, при которой происходит фазовый переход второго рода в рассматриваемой модели плоской дипольной решётки.

В дальнейшем мы будем различать низкие температуры $T < T_0$ $(\theta' > \theta^*)$ и высокие температуры $T > T_0$ $(\theta^* > \theta')$.

Переходим к определению собственных значений матрицы $\hat{P}$ и к вычислению функции распределения $Z(T)$.

§ 2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ $Z(T)$

Мы проведём здесь вычисление собственных значений матрицы

$$\hat{M} = \prod_{k=1}^{k=n} \exp(\theta' \hat{A}_k \hat{A}_{k+1}) \prod_{k=1}^{k=n} \exp(\theta^* \hat{B}_k), \tag{2,1}$$

отличающейся от матрицы распределения $\hat{P}$ числовым множителем $(2 \operatorname{sh} 2\theta)^{n/2}$.

Для вычисления удобно вместо системы 2^n-рядных матриц Паули $\hat{A}_k$, $\hat{B}_k$, $\hat{C}_k$, удовлетворяющих соотношениям:

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}_k \hat{B}_k &= i\hat{C}_k; \\ \hat{B}_k \hat{C}_k &= i\hat{A}_k; \\ \hat{C}_k \hat{A}_k &= i\hat{B}_k, \end{aligned}\right\} \tag{2,2}$$

ввести систему из $(2n+1)$ антикоммутирующих 2^n-рядных матриц Дирака по формулам:

$$\left.\begin{aligned} &\hat{\Gamma}_1 = \hat{C}_1, && \hat{\Gamma}_2 = \hat{A}_1, \\ &\hat{\Gamma}_3 = \hat{C}_2 \hat{B}_1, && \hat{\Gamma}_4 = \hat{A}_2 \hat{B}_1, \\ &\hat{\Gamma}_5 = \hat{C}_3 \hat{B}_1 \hat{B}_2, && \hat{\Gamma}_6 = \hat{A}_3 \hat{B}_1 \hat{B}_2, \\ &\cdots\cdots && \cdots\cdots \\ &\hat{\Gamma}_{2n-1} = \hat{C}_n \hat{B}_1 \hat{B}_2 \ldots \hat{B}_{n-1}, && \hat{\Gamma}_{2n} = \hat{A}_n \hat{B}_1 \hat{B}_2 \ldots \hat{B}_{n-1}, \end{aligned}\right\} \tag{2,3}$$

$$\hat{U} = \hat{B}_1 \hat{B}_2 \ldots \hat{B}_n = \prod_{k=1}^{k=n} (i \hat{\Gamma}_{2k} \hat{\Gamma}_{2k-1}). \tag{2,3'}$$

Легко убедиться, используя (2,2), что все $(2n+1)$ матрицы системы (2,3) антикоммутируют:

$$\left.\begin{aligned} \hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta+\hat{\Gamma}_\beta\hat{\Gamma}_\alpha&=2\delta\alpha\beta,\\ \hat{\Gamma}_\alpha\hat{U}+\hat{U}\hat{\Gamma}_\alpha&=0 \qquad (\alpha,\ \beta=1,\ 2,\dots,\ 2n).\\ U^2&=1. \end{aligned}\right\} \tag{2,4}$$

Принимая во внимание (2,2), вычисляем:

$$\left.\begin{aligned} \hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k}&=i\hat{B}_k,\\ \hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k+2}&=-i\hat{A}_k\hat{A}_{k+1}, \end{aligned}\right\} k=1,\ 2,\dots,\ (n-1)$$

$$\hat{\Gamma}_{2n-1}\hat{\Gamma}_2=\hat{C}_n\hat{B}_1\hat{B}_2\dots\hat{B}_{n-1}\hat{A}_1=-i\hat{A}_n\hat{B}_n\hat{B}_1\dots\hat{B}_{n-1}\hat{A}_1=i\hat{A}_n\hat{A}_1\hat{U} \tag{2,5}$$

и, следовательно:

$$\left.\begin{aligned} \hat{B}_k&=-i\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k},\\ \hat{A}_k\hat{A}_{k+1}&=i\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k+2},\\ \hat{A}_n\hat{A}_1&=-i\hat{\Gamma}_{2n-1}\hat{\Gamma}_2\hat{U} \end{aligned}\right\} k=1,\ 2,\dots,(n-1), \tag{2,5'}$$

Подставляя (2,5') в (2,1), получаем для матрицы $\hat{M}$ выражение

$$\hat{M}(\hat{U})=\exp(-i\theta'\hat{\Gamma}_{2n-1}\hat{\Gamma}_2\hat{U})\prod_{k=1}^{k=n-1}\exp(i\theta'\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k+2})\times$$
$$\times\prod_{k=1}^{k=n}\exp(-i\theta^*\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k}). \tag{2,6}$$

Введём в рассмотрение дополнительную матрицу

$$\hat{M}(-\hat{U})=\exp(i\theta'\hat{\Gamma}_{2n-1}\hat{\Gamma}_2\hat{U})\prod_{k=1}^{k=n-1}\exp(i\theta'\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k+2})\times$$
$$\times\prod_{k=1}^{k=n}\exp(-i\theta^*\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k}). \tag{2,6'}$$

Мы замечаем, что матрица $\hat{U}$ коммутирует с обеими матрицами $\hat{M}(\hat{U})$ и $\hat{M}(-\hat{U})$.

Поэтому все собственные значения $\eta(\nu)$ и собственные векторы матрицы $\hat{M}(\hat{U})$ распадаются на два класса:

1) положительные, для которых $\hat{U}=+1$:

$$\hat{M}(1)\,\psi^{+}(\nu)=\eta^{+}(\nu)\,\psi^{+}(\nu), \tag{2,7}$$

2) отрицательные, для которых $\hat{U}=-1$:

$$\hat{M}(-1)\,\psi^{-}(\nu)=\eta^{-}(\nu)\,\psi^{-}(\nu). \tag{2,7'}$$

Согласно (2, 7′) отрицательные собственные значения матрицы $\hat{M}(\hat{U})$ являются положительными собственными значениями матрицы $\hat{M}(-\hat{U})$. Итак, мы получим все 2^n собственных значений матрицы $\hat{M}\equiv\hat{M}(\hat{U})$, если найдём все 2^{n-1} положительные собственные значения матрицы:

$$\hat{M}^{+}\equiv\hat{M}(1)=\exp\left(-i\theta'\hat{\Gamma}_{2n-1}\hat{\Gamma}_2\right)\prod_{k=1}^{k=n-1}\exp\left(i\theta'\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k+2}\right)\times$$
$$\times\prod_{k=1}^{k=n}\exp\left(-i\theta^{*}\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k}\right) \tag{2,8}$$

и все 2^{n-1} положительные собственные значения матрицы

$$\hat{M}^{-}\equiv\hat{M}(-1)=\exp\left(i\theta'\hat{\Gamma}_{2n-1}\hat{\Gamma}_2\right)\prod_{k=1}^{k=n-1}\exp\left(i\theta'\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k+2}\right)\times$$
$$\times\prod_{k=1}^{k=n}\exp\left(-i\theta^{*}\hat{\Gamma}_{2k-1}\hat{\Gamma}_{2k}\right). \tag{2,8'}$$

Для вычисления воспользуемся следующим методом.

Матрицы Дирака $\hat{\Gamma}_\alpha$, удовлетворяющие условиям перестановок (2,4), можно подвергнуть произвольному комплексному ортогональному преобразованию:

$$\hat{\Gamma}'_\alpha=\sum_\beta L_{\alpha\beta}\hat{\Gamma}_\beta,$$

где $L_{\alpha\beta}$ — произвольная $2n$-рядная ортогональная матрица, причём новые $\hat{\Gamma}'_\alpha$ удовлетворяют тем же условиям перестановок. В самом деле, имеем:

$$\hat{\Gamma}'_\alpha\hat{\Gamma}'_\beta+\hat{\Gamma}'_\beta\hat{\Gamma}'_\alpha=\sum_{\sigma,\,\tau}\{(L_{\alpha\sigma}\hat{\Gamma}_\sigma)\;(L_{\beta\tau}\hat{\Gamma}_\tau)+(L_{\beta\tau}\hat{\Gamma}_\tau)\;(L_{\alpha\sigma}\hat{\Gamma}_\sigma)\}=$$

$$=\sum_{\sigma,\,\tau}L_{\alpha\sigma}L_{\beta\tau}\;(\hat{\Gamma}_\sigma\hat{\Gamma}_\tau+\hat{\Gamma}_\tau\hat{\Gamma}_\sigma)=2\sum_{\sigma,\,\tau}\delta_{\sigma\tau}L_{\alpha\sigma}L_{\beta\tau}=2\sum_{\sigma}L_{\alpha\sigma}L_{\beta\sigma}.$$

Но по условию ортогональности $\sum\limits_{\sigma}L_{\alpha\sigma}L_{\beta\sigma}=\delta_{\alpha\beta}$ и, следовательно:

$$\hat{\Gamma}'_\alpha\hat{\Gamma}'_\beta+\hat{\Gamma}'_\beta\hat{\Gamma}'_\alpha=2\delta_{\alpha\beta},$$

т. е. утверждение доказано.

С другой стороны, покажем, что если матрицы Дирака $\hat{\Gamma}_\alpha$ подвергнуть преобразованию подобия при помощи матриц $\hat{M}^+$ или $\hat{M}^-$, то новые матрицы $\hat{\Gamma}^+_\alpha$ и $\hat{\Gamma}^-_\alpha$:

$$\Gamma^+_\alpha=\hat{M}^+\hat{\Gamma}_\alpha\,(\hat{M}^+)^{-1}\;\text{ и }\;\hat{\Gamma}^-_\alpha=\hat{M}^-\hat{\Gamma}_\alpha\,(\hat{M}^-)^{-1}\tag{2,9}$$

связаны со старыми матрицами $\hat{\Gamma}_\alpha$ ортогональными преобразованиями:

$$\hat{\Gamma}^+_\alpha=\sum_{\beta}L^+_{\sigma\beta}\hat{\Gamma}_\beta\;\text{ и }\;\hat{\Gamma}^-_\alpha=\sum_{\beta}L^-_{\alpha\beta}\hat{\Gamma}_\beta\,.\tag{2,9'}$$

Для этого достаточно заметить, что матрицы $\hat{M}^+$ и $\hat{M}^-$ являются произведениями множителей вида

$$\exp(\lambda\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta)=\cos\lambda+\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta\sin\lambda,$$

где λ — произвольный комплексный параметр, и убедиться в справедливости следующих формул:

$$\left.\begin{aligned}&\exp(\lambda\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta)\,\hat{\Gamma}_\alpha\exp(-\lambda\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta)=\hat{\Gamma}_\alpha\cos 2\lambda-\hat{\Gamma}_\beta\sin 2\lambda,\\&\exp(\lambda\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta)\,\hat{\Gamma}_\beta\exp(-\lambda\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta)=\hat{\Gamma}_\alpha\sin 2\lambda+\hat{\Gamma}_\beta\cos 2\lambda,\\&\exp(\lambda\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta)\,\hat{\Gamma}_\gamma\exp(-\lambda\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta)=\hat{\Gamma}_\gamma\;(\gamma\neq\alpha,\beta).\end{aligned}\right\}\tag{2,10}$$

Мы приходим, следовательно, к основным формулам:

$$\hat{\Gamma}_\alpha^+ = \hat{M}^+\Gamma_\alpha(\hat{M}^+)^{-1} = \sum_{(\beta)} L^+_{\alpha\beta}\Gamma_\beta\,, \tag{2,11}$$

$$\hat{\Gamma}_\alpha^- = \hat{M}^-\Gamma_\alpha(\hat{M}^-)^{-1} = \sum_{\beta} L^-_{\alpha\beta}\Gamma_\beta\,, \tag{2,11'}$$

лежащим в основе излагаемого далее метода вычисления собственных значений матриц $\hat{M}^+$ и $\hat{M}^-$.

Заметим, что матрицы $\hat{M}^+$ и $\hat{M}^-$ являются специальными случаями более общей 2^n-рядной матрицы вида

$$\hat{S} = \prod_{\alpha,\beta} \exp(\Lambda_{\alpha\beta}\hat{\Gamma}_\alpha\hat{\Gamma}_\beta), \tag{2,12}$$

где $\Lambda_{\alpha\beta} = -\Lambda_{\beta\alpha}$ — произвольные числа, в общем случае комплексные. Мы покажем, как вычислять собственные значения такой матрицы $\hat{S}$, исходя из общей формулы:

$$\hat{\Gamma}'_\alpha = \hat{S}\hat{\Gamma}_\alpha\hat{S}^{-1} = \sum_{\beta} L_{\alpha\beta}\hat{\Gamma}_\beta. \tag{2,13}$$

Если ввести 2^n-мерный матричный вектор $\hat{\Gamma}$ с компонентами $\hat{\Gamma}_\alpha$, то формула (2,12) может быть в сжатом виде записана как

$$\hat{\Gamma}' = \hat{S}\hat{\Gamma}\hat{S}^{-1} = \hat{L}\hat{\Gamma}. \tag{2,12'}$$

Простой геометрический смысл выражения (2,12′) заключается в том, что одному и тому же вращению 2^n-мерного пространства ($\hat{\Gamma}_\alpha \to \Gamma'_\alpha$) сопоставляется, с одной стороны, $2n$-рядная ортогональная матрица $\hat{L}$ (по формуле $\hat{\Gamma}' = \hat{L}\hat{\Gamma}$), с другой стороны, 2^n-рядная матрица $\hat{S}$ (по формуле $\hat{\Gamma}' = \hat{S}\hat{\Gamma}\hat{S}^{-1}$). Поскольку произведению двух матриц $\hat{L}_1$ и $\hat{L}_2$ сопоставляется по формуле

$$\Gamma' = \hat{S}_2\hat{S}_1\Gamma\hat{S}_1^{-1}\hat{S}_2^{-1} = (\hat{S}_2\hat{S}_1)\,\Gamma\,(\hat{S}_2\hat{S}_1)^{-1} = \hat{L}_2\hat{L}_1\,\Gamma \tag{2,13'}$$

произведение им соответствующих матриц $\hat{S}_1$ и $\hat{S}_2$, мы имеем дело с 2^n-рядным представлением группы вращений в $2n$-мерном пространстве. Изучение этого представления составляет содержание теории спиноров в многомерных пространствах.

В связи с теорией спиноров отметим лишь следующее. В теории Дирака волновая функция является четырёхкомпонентной комплексной величиной ψ_σ — так называемым спинором. При переходе к новой системе отсчёта

$$x'_1,\ x'_2,\ x'_3,\ x'_4=ict',$$

осуществляемом комплексной ортогональной матрицей Лоренца

$$x'_i=\sum_{(k)} L_{ik}x_k \qquad (i,\ k=1,\ 2,\ 3,\ 4), \tag{2,14}$$

четыре составляющих спинора Ψ_σ преобразуются по формулам:

$$\psi'_\sigma=\sum_{(\tau)} S_{\sigma\tau}\psi_\tau \qquad (\sigma,\ \tau=1,\ 2,\ 3,\ 4), \tag{2,14'}$$

причём

$$\hat{S}\hat{\gamma}_k\hat{S}^{-1}=\sum_{(i)} L_{ki}\hat{\gamma}_i, \tag{2,15}$$

где $\hat{\gamma}_k$ — четыре матрицы Дирака. Мы имеем здесь частный случай формулы (2,12) при $n=2$. В этом частном случае обе матрицы, 2^n-рядная матрица $\hat{S}$ и $2n$-рядная матрица $\hat{L}$, оказываются четырёхрядными. Подробнее см., например, [6].

Однако для нашей цели оказывается излишним пользоваться готовой теорией спиноров в многомерных пространствах, как это сделала Кауфман [3] в своей работе. Мы получим всё необходимое проще, используя лишь элементарные методы матричной алгебры.

Пусть нам удалось найти в $2n$-мерном комплексном пространстве такую систему координат, в которой комплексная ортогональная матрица $\hat{L}$ представлена как прямая сумма из n двухрядных матриц. В приложении показано, что эта задача эквивалентна задаче об определении комплексных собственных значений матрицы $\hat{L}$.

Обозначая через Γ^*_α составляющие матричного вектора Γ в такой системе координат и через $\exp(\pm 2\lambda_k)$ — собственные значения матрицы $\hat{L}$, имеем:

$$\hat{L}^*=\begin{pmatrix} \cos 2i\lambda_1, & \sin 2i\lambda_1 \\ -\sin 2i\lambda_1, & \cos 2i\lambda_1 \end{pmatrix} \dot{+} \begin{pmatrix} \cos 2i\lambda_2, & \sin 2i\lambda_2 \\ -\sin 2i\lambda_2, & \cos 2i\lambda_2 \end{pmatrix} \dot{+} \cdots$$
$$\cdots \dot{+} \begin{pmatrix} \cos 2i\lambda_n, & \sin 2i\lambda_n \\ -\sin 2i\lambda_n, & \cos 2i\lambda_n \end{pmatrix}\Bigg| . \tag{2,16}$$

В такой системе координат матрица $\hat{S}$ будет согласно формуле

(2,13) представлена как произведение n коммутирующих матриц

$$\hat{S}^* = \hat{S}(\lambda_1)\,\hat{S}(\lambda_2)\ldots\hat{S}(\lambda_n), \tag{2,17}$$

где согласно формулам (2,10)

$$\hat{S}(\lambda_k) = \exp\left(-i\lambda_k\,\hat{\Gamma}^*_{2k-1}\,\hat{\Gamma}^*_{2k}\right). \tag{2,18}$$

В рассматриваемой специальной системе координат имеем, следовательно:

$$\hat{S}^* = \prod_{k=1}^{k=n} \exp\left(-i\lambda_k\,\Gamma^*_{2k-1}\Gamma^*_{2k}\right). \tag{2,17'}$$

Принимая во внимание, что собственными значениями всех коммутирующих матриц $i\,\hat{\Gamma}^*_{2k-1}\hat{\Gamma}^*_{2k}$ будут ± 1, мы можем сразу записать собственные значения матрицы $\hat{S}$ в виде

$$(\nu\,|\hat{S}|\,\nu) = \exp\left(\pm\lambda_1 \pm \lambda_2 \pm \ldots \pm \lambda_n\right). \tag{2,19}$$

Мы получим все 2^n собственных значения матрицы, выбирая все возможные 2^n комбинации знаков в (2,19).

Итак, мы пришли к следующему простому результату. Для того чтобы найти собственные значения 2^n-рядной матрицы $\hat{S}$, удовлетворяющей условиям (2,12), достаточно найти $2n$ собственных значения $2n$-рядной матрицы $\hat{L}$.

Мы переходим теперь к частной задаче вычисления собственных значений матриц $M+$ и $M-$, что эквивалентно, как мы показали, вычислению собственных значений им соответствующих матриц $\hat{L}+$ и $\hat{L}-$.

Вместо самих матриц $\hat{L}+$ и $\hat{L}-$ нам удобнее иметь дело с им соответствующими ортогональными преобразованиями $2n$-мерного комплексного пространства

$$R_{2n} = \{x_1, y_1, x_2, y_2, \ldots, x_n, y_n\}.$$

Принимая во внимание определения (2,8) и (2,8′) и формулы (2,10), мы можем выписать интересующие нас ортогональные преобразования пространства $R_{2n} \to R'_{2n}$ и $R'_{2n} \to R''_{2n}$ в виде

$$\left.\begin{aligned}
x'_k &= x_k\cos(-2i\theta^*) - y_k\sin(-2i\theta^*),\\
y'_k &= {}_k\sin(-2i\theta^*) + y_k\cos(-2i\theta^*),\\
x''_k &= x'_k\cos(2i\theta') - y'_{k+1}\sin(2i\theta'),\\
y''_{k+1} &= x'_k\sin(2i\theta') + y'_{k+1}\cos(2i\theta'),
\end{aligned}\right\} \tag{2,20}$$

причём мы должны согласно (2,8) и (2,8′) положить:

$$\left.\begin{array}{lll} \text{В случае матрицы } L^{+}: & y_{n+1}=-y_1, \\ \text{»} \quad \text{»} \quad \text{»} \quad L^{-}: & y_{n+1}=+y_1. \end{array}\right\} \tag{2,21}$$

Вычисление собственных значений матриц L^{+} и L^{-} произведём в два последовательных этапа. Сперва представим эти матрицы в виде прямых сумм двухрядных унимодулярных матриц, а затем приведём каждую из двухрядных матриц к диагональному виду.

Для того чтобы удовлетворить «краевым условиям» (2,21), совершим преобразование:

$$x_k = X(\beta)\exp(ik\beta); \quad y_k = Y(\beta)\exp(ik\beta). \tag{2,22}$$

Подставляя (2,22) в (2,21), получаем для β последовательность $2n$ дискретных значений:

$$\left.\begin{array}{l} \text{в случае матрицы } L^{+}: \\ \qquad \beta_{2k-1} = \frac{\pi}{n}(2k-1); \\ \text{в случае матрицы } L^{-}: \\ \qquad \beta_{2k} = \frac{\pi}{n}2k. \end{array}\right\} \tag{2,23}$$

Подставляя (2,22) в (2,20) и обозначая $X\left(\frac{\pi\alpha}{n}\right)=X_\alpha$, $Y\left(\frac{\pi\alpha}{n}\right)= = Y_\alpha$, находим:

$$\left.\begin{array}{l} \left.\begin{array}{l} X'_\alpha = X_\alpha \cos 2i\theta^* + Y_\alpha \sin 2i\theta^*, \\ Y'_\alpha = -X_\alpha \sin 2i\theta^* + Y_\alpha \cos 2i\theta^* \end{array}\right\} \\ \left.\begin{array}{l} X''_\alpha = X'_\alpha \cos 2i\theta' - Y'_\alpha \exp\left(\frac{i\pi\alpha}{n}\right)\sin 2i\theta', \\ Y''_\alpha = X'_\alpha \exp\left(-\frac{i\pi\alpha}{n}\right)\sin 2i\theta' + Y'_\alpha \cos 2i\theta'. \end{array}\right\} \end{array}\right\} \tag{2,24}$$

Преобразование, переводящее $\{X_\alpha,\ Y_\alpha\} \to \{X''_\alpha,\ Y''_\alpha\}$, запишется в виде

$$\left.\begin{array}{l} X''_\alpha = X_\alpha\left\{\cos 2i\theta' \cos 2i\theta^* + \exp\left(\frac{i\pi\alpha}{n}\right)\sin 2i\theta' \sin 2i\theta^*\right\} + \\ \qquad + Y_\alpha\left\{\cos 2i\theta' \sin 2i\theta^* - \exp\left(\frac{i\pi\alpha}{n}\right)\sin 2i\theta' \cos 2i\theta^*\right\}, \\ Y''_\alpha = X_\alpha\left\{-\cos 2i\theta' \sin 2i\theta^* + \exp\left(-\frac{i\pi\alpha}{n}\right)\sin 2i\theta' \cos 2i\theta^*\right\} + \\ \qquad + Y_\alpha\left\{\cos 2i\theta' \cos 2i\theta^* + \exp\left(-\frac{i\pi\alpha}{n}\right)\sin 2i\theta' \sin 2i\theta^*\right\}. \end{array}\right\} \tag{2,25}$$

Обозначая унимодулярную матрицу этого преобразования через

$$\begin{pmatrix} A_\alpha & B_\alpha \\ C_\alpha & D_\alpha \end{pmatrix}, \tag{2,25'}$$

мы можем записать L^+ и L^- в виде прямой суммы двухрядных унимодулярных матриц, причём согласно (2,23)

$$\left.\begin{aligned} L^+ &= \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \\ C_1 & D_1 \end{pmatrix} \dot{+} \begin{pmatrix} A_3 & B_3 \\ C_3 & D_3 \end{pmatrix} \dot{+} \ldots \dot{+} \begin{pmatrix} A_{2n-1} & B_{2n-1} \\ C_{2n-1} & D_{2n-1} \end{pmatrix}, \\ L^- &= \begin{pmatrix} A_2 & B_2 \\ C_2 & D_2 \end{pmatrix} \dot{+} \begin{pmatrix} A_4 & B_4 \\ C_4 & D_4 \end{pmatrix} \dot{+} \ldots \dot{+} \begin{pmatrix} A_{2n} & B_{2n} \\ C_{2n} & D_{2n} \end{pmatrix}. \end{aligned}\right\} \tag{2,26}$$

Первый этап наших вычислений закончен. Нам осталось теперь каждую из слагаемых матриц привести к диагональному виду.

Характеристическое уравнение

$$\begin{aligned} &\xi^2 - (A_\alpha + D_\alpha)\,\xi + 1 \equiv \\ &\equiv \xi^2 - 2\left\{\operatorname{ch} 2\theta' \operatorname{ch} 2\theta^* - \cos\frac{\pi\alpha}{n} \operatorname{sh} 2\theta' \operatorname{sh} 2\theta^*\right\} + 1 = 0 \end{aligned} \tag{2,27}$$

имеет вещественные корни, которые мы обозначим через $e^{2\gamma_\alpha}$ и $e^{-2\gamma_\alpha}$,

где

$$\operatorname{ch} 2\gamma_\alpha = \operatorname{ch} 2\theta' \operatorname{ch} 2\theta^* - \cos\frac{\pi}{n}\alpha \operatorname{sh} 2\theta' \operatorname{sh} 2\theta^* = \cos 2i\gamma_\alpha .$$

Зная теперь собственные значения матриц $\hat{L}^+$ и $\hat{L}^-$, мы можем переписать их в такой системе координат x_k^* и y_k^*, в которой они будут представлены как прямые суммы:

$$\left.\begin{aligned} L^+ &= \begin{pmatrix} \cos 2i\gamma_1, & \sin 2i\gamma_1 \\ -\sin 2i\gamma_1, & \cos 2i\gamma_1 \end{pmatrix} \dot{+} \begin{pmatrix} \cos 2i\gamma_3, & \sin 2i\gamma_3 \\ -\sin 2i\gamma_3, & \cos 2i\gamma_3 \end{pmatrix} \dot{+} \ldots \\ &\qquad \ldots \dot{+} \begin{pmatrix} \cos 2i\gamma_{2n-1}, & \sin 2i\gamma_{2n-1} \\ -\sin 2i\gamma_{2n-1}, & \cos 2i\gamma_{2n-1} \end{pmatrix}, \\ L^- &= \begin{pmatrix} \cos 2i\gamma_2, & \sin 2i\gamma_2 \\ -\sin 2i\gamma_2, & \cos 2i\gamma_2 \end{pmatrix} \dot{+} \ldots \dot{+} \begin{pmatrix} \cos 2i\gamma_{2n}, & \sin 2i\gamma_{2n} \\ -\sin 2i\gamma_{2n}, & \cos 2i\gamma_{2n} \end{pmatrix}. \end{aligned}\right\} \tag{2,26'}$$

В этой системе координат матрицы M^+ и M^- представятся в виде произведения коммутирующих матриц

$$\left.\begin{aligned} M^{*+} &= \prod_{k=1}^{k=n} \exp\left(-i\gamma_{2k-1}\Gamma^{*}_{2k-1}\Gamma^{*}_{2k}\right), \\ M^{*-} &= \prod_{k=1}^{k=n} \exp\left(-i\gamma_{2k}\Gamma^{*}_{2k-1}\Gamma^{*}_{2k}\right), \end{aligned}\right\} \tag{2,28}$$

и их собственные значения через

$$\left.\begin{aligned} \eta^{+}(\nu) &= \exp\left(\pm\gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \ldots \pm \gamma_{2n-1}\right), \\ \eta^{-}(\nu) &= \exp\left(\pm\gamma_2 \pm \gamma_4 \pm \ldots \pm \gamma_{2n}\right). \end{aligned}\right\} \tag{2,29}$$

Нам остаётся теперь ещё отобрать положительные собственные значения матриц $\hat{M}^{+}$ и $\hat{M}^{-}$. Для этого замечаем, что оператор $\hat{U}^{*}$, определённый формулой (2,3′)

$$\hat{U}^{*} = \prod_{k=1}^{k=n} \left(i\hat{\Gamma}^{*}_{2k}\hat{\Gamma}^{*}_{2k-1}\right), \tag{2,30}$$

является произведением n коммутирующих матриц, каждая из которых имеет собственные значения ± 1.

Принимая во внимание (2,28) и (2,29), мы видим, что $\hat{U}^{*}$ будет иметь значение $+1$, если выбор знаков в (2,29) ограничить требованием, что число минусов должно быть чётным. Налагая это требование, мы отбираем 2^{n-1} положительных собственных значения матрицы $\hat{M}^{+}$ и 2^{n-1} положительных собственных значения матрицы $\hat{M}^{-}$, т. е. получаем все 2^{n} собственных значения матрицы $\hat{M}$, которая лишь множителем $(2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2}$ отличается от матрицы распределения $\hat{P}$.

Зная собственные значения матрицы $\hat{P}$, мы можем записать собственные значения матрицы $\hat{P}^{m}$ в виде

$$\left.\begin{aligned} \{E^{+}(\nu)\}^{m} &= (2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{\frac{nm}{2}} \exp m\left\{\pm\gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \ldots \pm \gamma_{2n-1}\right\}, \\ \{E^{-}(\nu)\}^{m} &= (2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{\frac{nm}{2}} \exp m\left\{\pm\gamma_2 \pm \gamma_4 \pm \ldots \pm \gamma_{2n}\right\} \end{aligned}\right\} \tag{2,31}$$

и вычислить функцию распределения по формуле (1,10)

$$Z(T)=(2\operatorname{sh}2\theta)^{\frac{mn}{2}}\left\{\sum_{(\nu)}\exp m(\pm\gamma_1\pm\ldots\pm\gamma_{2n-1})+\right.$$

$$\left.+\sum_{(\nu)}\exp m(\pm\gamma_2\pm\ldots\pm\gamma_{2n})\right\}, \quad (2,32)$$

где суммирование происходит по всем разрешаемым наборам знаков. Легко проверить, что в результате вычисления мы получим:

$$Z(T)=\frac{1}{2}(2\operatorname{sh}2\theta)^{\frac{mn}{2}}\left\{\prod_{k=1}^{k=n}(2\operatorname{ch}m\gamma_{2k-1})+\prod_{k=1}^{k=n}(2\operatorname{sh}m\gamma_{2k-1})+\right.$$

$$\left.+\prod_{k=1}^{k=n}(2\operatorname{sh}m\gamma_{2k})+\prod_{k=1}^{k=n}(2\operatorname{sh}m\gamma_{2k})\right\}. \quad (2,32')$$

Функция распределения $Z(T)$ является аналитической функцией аргумента T во всём диапазоне изменения температуры и точка $\theta'=\theta^*$ является для неё обыкновенной точкой. Мы приходим к важному выводу, что решётка, состоящая из конечного числа диполей, не обнаруживает фазового перехода второго рода.

Рассмотрим теперь случай решётки, бесконечной лишь в одном направлении, т. е. устремим $m\to\infty$, сохранив для n конечное значение. При $m\to\infty$ имеем по формуле (1,10)

$$Z(T)=E_1^m\left\{1+\left(\frac{E_2}{E_1}\right)^m+\ldots+\frac{E(2^n)^m}{E_1}\right\}\to E_1^m, \quad (2,33)$$

где через E_1 обозначено максимальное собственное значение матрицы $\hat{P}$. Введём «функцию распределения $\Lambda(T)$ на один столбец» как предел:

$$\Lambda(T)=\lim_{m\to\infty}\sqrt[m]{Z(T)}=E_{\text{макс}} \quad (2,34)$$

и, воспользовавшись выражениями (2,31), найдём:

$$\Lambda(T)=(2\operatorname{sh}2\theta)^{\frac{n}{2}}\exp(\gamma_1+\gamma_3+\ldots+\gamma_{2n-1}). \quad (2,34')$$

Функция распределения $\Lambda(T)$ также является аналитической функцией аргумента T во всём диапазоне изменения температуры. Мы видим, что бесконечная решётка, состоящая из конечного числа строк, также не обнаруживает фазового перехода второго рода. Мы увидим в § 4, что фазовый переход второго рода появляется лишь в случае решётки, бесконечно протяжённой в обоих направлениях.

§ 3. СПЕКТР МАТРИЦЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ $\hat{P}$

Для понимания различия в физических свойствах модели плоской дипольной решётки при низких и высоких температурах полезно составить себе представление о характере спектра матрицы $\hat{P}$ и о зависимости его термов от температуры. Нас будет здесь интересовать случай больших значений n в пределе, асимптотически стремящимся к бесконечности.

Мы получили выражения для термов матрицы $\hat{P}$:
положительные:

$$E^{+}(\nu)=(2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2}\exp\{\pm\gamma_1\pm\gamma_3\pm\ldots\pm\gamma_{2n-1}\},\qquad(3,1)$$

отрицательные:

$$E^{-}(\nu)=(2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2}\exp\{\pm\gamma_0\pm\gamma_2\pm\ldots\pm\gamma_{2n-2}\},\qquad(3,1')$$

где

$$\gamma_\alpha=\gamma_{2n-\alpha},\qquad(3,2)$$

$$\mathrm{ch}\,2\gamma_\alpha=\mathrm{ch}\,2\theta'\,\mathrm{ch}\,2\theta^*-\cos\frac{\pi\alpha}{n}\,\mathrm{sh}\,2\theta'\,\mathrm{sh}\,2\theta^*,\qquad(3,3)$$

причём выбор знаков ограничен требованием, чтобы в обоих выражениях число знаков минус было чётным.

Согласно формулам (3,2) и (3,3) все величины

$$\gamma_0<\gamma_1<\ldots<\gamma_n$$

лежат в диапазоне

$$\gamma_0=\theta'-\theta^*<\gamma_\alpha<\gamma_n=\theta'+\theta^*,\qquad(3,4)$$

причём все они, за исключением $\gamma_0=\theta'-\theta^*$, сохраняют свой знак во всём диапазоне изменения температуры. Лишь γ_0 меняет знак при $\theta'=\theta^*$, становясь при высоких температурах отрицательным. Зависимость величин γ_α от температуры для случая изотропной решётки $\theta'=\theta$ приведена на рис. 1.

Различие в знаке у γ_0 обусловливает, как мы увидим, различие в характере спектра при низких и высоких температурах. Рассмотрим оба диапазона раздельно:

Низкие температуры: $T<T_0$; $(\theta^*<\theta')$.

Принимая во внимание, что все γ_α положительные и что при $n\to\infty$

$$|\gamma_\alpha-\gamma_{\alpha-1}|\to 0\left(\frac{1}{n}\right),\qquad(3,4')$$

мы заключаем, что спектр матрицы $\hat{P}$ состоит из чередующейся последовательности положительных и отрицательных термов, образующих тонкие дублеты, расстояние между компонентами которых асимптотически при $n \to \infty$ стремится к нулю. Мы говорим о двукратном квазивырождении каждого терма.

Для максимального дублета имеем, выбирая в (3,1) все знаки положительными:

$$\left.\begin{aligned} E_1^+ &= E_{\text{макс}}^+ = (2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2} \exp\{\gamma_1 + \gamma_3 + \ldots + \gamma_{2k-1}\}, \\ E_1^- &= E_{\text{макс}}^- = (2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2} \exp\{\gamma_0 + \gamma_2 + \ldots + \gamma_{2n-2}\}. \end{aligned}\right\} \quad (3,5)$$

Для следующего, второго дублета получаем, соблюдая правило выбора знаков:

$$\left.\begin{aligned} E_2^+ &= (2\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2} \exp\{-\gamma_1 + \gamma_3 + \ldots - \gamma_{2n-1}\}, \\ E_1^- &= (2\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2} \exp\{\gamma_0 - \gamma_2 + \ldots - \gamma_{2n-2}\}. \end{aligned}\right\} \quad (3,6)$$

Принимая во внимание, что $\gamma_1 = \gamma_{2n-1}$, $\gamma_2 = \gamma_{2n-2}$, мы заключаем,

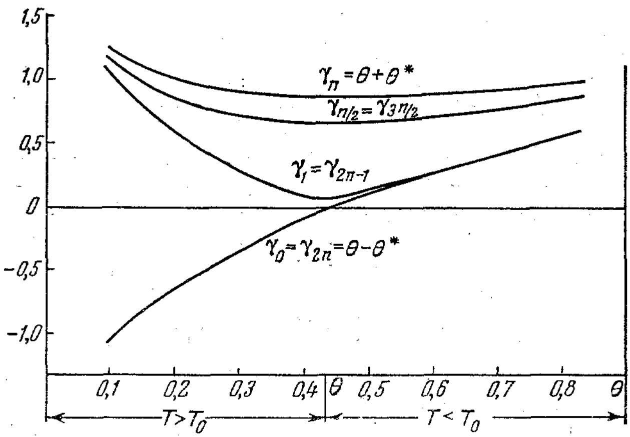

Рис. 1.

что относительное расстояние между двумя первыми дублетами стремится при $n \to \infty$ к конечному пределу:

$$(E_1^+ - E_2^+)/E_{\text{макс}}^+ \to 1 - \exp(-4\gamma_0) = 1 - \exp 4(\theta^* - \theta'). \quad (3,7)$$

Применяя правило отбора знаков, мы замечаем, что к каждому терму E_2^+ и E_2^- примыкает последовательность термов E_k^+ и E_k^-, логарифмы которых будут:

$$\begin{aligned} \ln E_k^+ &= \ln E_{\text{макс}}^+ - 4\gamma_{2k-1} \qquad \left(k = 2, 3, \ldots, \left[\frac{n}{2}\right]\right), \\ \ln E_k^- &= \ln E_{\text{макс}}^- - 4\gamma_{2k}. \end{aligned} \quad (3,8)$$

Относительные расстояния между ними даются формулами:

$$\left.\begin{aligned}(E_k^+ - E_{k-1}^+)/E_{\text{макс}} = \exp(-4\gamma_{2k-3}) - \exp(-4\gamma_{2k-1}),\\ (E_k^- - E_{k-1}^-)/E_{\text{макс}} = \exp(-4\gamma_{2k-2}) - \exp(-4\gamma_{2k})\end{aligned}\right\} \quad (3,9)$$

и при $n \to \infty$ стремятся к нулю. Мы заключаем, что к E_2^+ и E_2^-

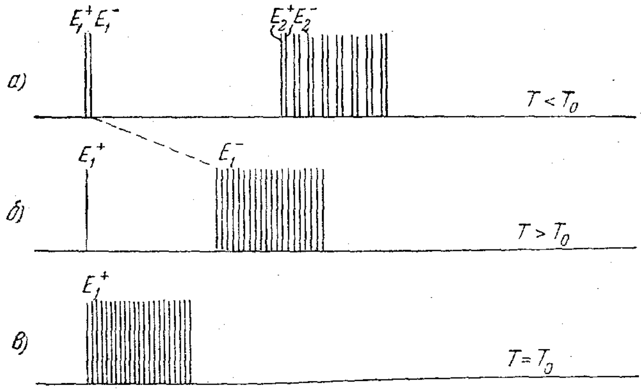

Рис. 2.

примыкает последовательность близких термов и что спектр делается квазинепрерывным. Характер спектра изображён на рис. 2,*а*.

Высокие температуры: $T > T_c$; $(\theta' < \theta^*)$.

Принимая во внимание, что при $\theta' = \theta^*$ величина $\gamma_0 = \gamma_{2n}$ изменяет свой знак и становится отрицательной, имеем при $n \to \infty$:

$$\left.\begin{aligned}&\gamma_0 \to -\gamma_1 \quad (\alpha = 2,\ 3,\ \ldots,\ 2n),\\ &|\gamma_\alpha - \gamma_{\alpha-1}| \to 0\left(\frac{1}{n}\right).\end{aligned}\right\} \quad (3,10)$$

Для максимальных термов имеем теперь:

$$\left.\begin{aligned}E_1^+ = E_{\text{макс}}^+ = (2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2} \exp\{\gamma_1 + \gamma_3 + \ldots + \gamma_{2n-1}\},\\ E_1^- = E_{\text{макс}}^- = (2\,\mathrm{sh}\,2\theta)^{n/2} \exp\{-|\gamma_0| + \gamma_2 + \ldots + \gamma_{2n-2}\}.\end{aligned}\right\} \quad (3,11)$$

Мы видим, что двукратное квазивырождение максимального терма снимается и относительное расстояние между его компонентами при $n \to \infty$ стремится к конечному пределу

$$(E_{\text{макс}}^+ - E_{\text{макс}}^-)/E_{\text{макс}}^+ = 1 - \exp(-2|\gamma_0|) = \\ = 1 - \exp 2(\theta^* - \theta'). \quad (3,12)$$

Применяя правило отбора знаков, мы замечаем, что к терму $E^{-}_{\text{макс}}$ примыкает последовательность близких термов E^{-}_{k}, логарифмы которых будут

$$\ln E^{-}_{k} = \ln E^{-}_{\text{макс}} + 2\,|\gamma_0| - 2\gamma_{2k}, \tag{3,13}$$

относительные расстояния между этими термами даются формулами:

$$(E^{-}_{k} - E^{-}_{k-1})/E^{-}_{\text{макс}} = \exp(-2\gamma_{2k}) - \exp(-2\gamma_{2k-2}) \tag{3,14}$$

и при $n \to \infty$ стремятся к нулю. Мы замечаем, что спектр делается квазинепрерывным и получает характер, изображённый на рис. 2, *б*.

Наконец, в точке перехода $\theta' = \theta^*$, как показывают формулы (3,7) и (3,12), весь спектр делается квазинепрерывным (рис. 2, *в*).

§ 4. ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ БЕСКОНЕЧНОЙ ПЛОСКОЙ РЕШЁТКИ

Совершим предельный переход к случаю бесконечной решётки, устремив число столбцов m и число строк n к бесконечности. Введём «функцию распределения на один диполь» $\lambda(T)$ по формуле

$$\lambda(T) = \lim_{\substack{m \to \infty \\ n \to \infty}} \sqrt[nm]{Z(T)}. \tag{4,1}$$

Свободная энергия f, внутренняя энергия ε и теплоёмкость c, рассчитанные на один диполь, даются выражениями:

$$f = -kT \ln \lambda; \quad \varepsilon = kT^2 \frac{d \ln \lambda(T)}{dT}; \quad c = kT \frac{d^2 (T \ln \lambda)}{dT^2}. \tag{4,2}$$

Принимая во внимание формулы (2,33) и (2,34), получим:

$$\left.\begin{aligned} \ln \lambda(T) &= \frac{1}{2} \ln(2 \operatorname{sh} 2\theta) + \lim_{n \to \infty} (\gamma_1 + \gamma_3 + \ldots + \gamma_{2n-1})/n = \\ &= \frac{1}{2} \ln(2 \operatorname{sh} 2\theta) + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \gamma(\omega)\, d\omega, \end{aligned}\right\} \tag{4,3}$$

где согласно (3,3)

$$\operatorname{sh} 2\gamma(\omega) = \operatorname{ch} 2\theta' \operatorname{ch} 2\theta^* - \cos\omega \operatorname{sh} 2\theta' \operatorname{sh} 2\theta^*. \tag{4,4}$$

Воспользовавшись формулой (см. приложение)

$$2\gamma = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \ln(\operatorname{ch} 2\gamma - \cos\omega')\, d\omega' + \ln 2,$$

мы можем интеграл в (4,3) переписать в виде двойного интеграла и получить:

$$\ln\lambda = \frac{1}{2}\ln(2\operatorname{sh}2\theta) + \frac{1}{2}\ln 2 +$$
$$+\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi \ln(\operatorname{ch}2\gamma(\omega) - \cos\omega')\,d\omega\,d\omega'. \tag{4,5}$$

Записав, наконец, первый член в (4,5) в виде интеграла

$$\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi \ln(2\operatorname{sh}2\theta)\,d\omega\,d\omega',$$

мы можем переписать (4,5) в виде

$$\ln\lambda = \frac{1}{2}\ln 2 + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi \ln(\operatorname{sh}2\theta\operatorname{ch}2\gamma(\omega) - \cos\omega'\operatorname{sh}2\theta)\,d\omega\,d\omega'. \tag{4,5'}$$

Принимая во внимание (4,3) и (1,34), имеем:

$$\operatorname{sh}2\theta\operatorname{ch}2\gamma(\omega) = \operatorname{ch}2\theta'\operatorname{ch}2\theta - \operatorname{sh}2\theta'\cos\omega$$

и получаем для $\ln\lambda(T)$ выражение, симметричное в θ и θ'

$$\ln\lambda(T) = \frac{1}{2}\ln 2 +$$
$$+\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi \ln(\operatorname{ch}2\theta'\operatorname{ch}2\theta - \operatorname{sh}2\theta'\cos\omega - \operatorname{sh}2\theta\cos\omega')\,d\omega\,d\omega'. \tag{4,6}$$

Покажем, что при температуре $\theta^* = \theta'$ функция $\ln\lambda(T)$ имеет особенность, и исследуем характер этой особенности. Из формулы (4,4) мы видим, что при $\theta' = \theta^*$ и $\omega = 0$ функция $\operatorname{ch}2\gamma(\omega) = 1$ и, следовательно, по формуле (4,5) двойной интеграл при $\theta' = \theta^*$ имеет на нижнем пределе $\omega = 0$; $\omega' = 0$ особенность.

Для того чтобы в общем виде исследовать эту особенность, запишем выражение (4,5) в виде

$$\ln\lambda(T) = A(T) + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\alpha\int_0^\beta \ln(\operatorname{ch}2\gamma(\omega) - \cos\omega')\,d\omega\,d\omega', \tag{4,7}$$

где $A(T)$ — функция, регулярная при $T = T_0$; α, β — малые величины.

Разлагая подинтегральную функцию в ряд Тейлора по степеням малых количеств $\tau = \theta' - \theta^*$, ω, ω', получим:

$$\ln\lambda(T) = A(T) + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\alpha\int_0^\beta \ln\left(2\tau^2 + \frac{1}{2}\operatorname{sh}^2 2\theta^*\omega^2 + \frac{1}{2}2\omega'^2\right)d\omega\,d\omega'. \tag{4,8}$$

Произведя замену переменных интегрирования по формулам

$$\frac{\omega}{\sqrt{2}}\operatorname{sh}2\theta^* = \rho\cos\varphi, \qquad \frac{\omega'}{\sqrt{2}} = \rho\sin\varphi, \tag{4,9}$$

мы получим:

$$\ln \lambda(T) = A(T) + \frac{2}{\operatorname{sh} 2\theta^*} \int\limits_0^{\varphi'} d\varphi \int\limits_0^{\rho'} \rho \ln(2\tau^2 + \rho^2)\, d\rho, \tag{4,10}$$

где φ' и ρ' — новые верхние пределы интегрирования, уже зависящие от температуры. Выполняя интегрирование, мы получаем окончательно для $\ln \lambda(T)$ выражение вида

$$\ln \lambda(T) = P(T) + Q(T)\, \tau^2 \ln \tau, \tag{4,11}$$

где $P(T)$ и $Q(T)$ — две функции, регулярные при $T = T_0$.

Из выражения (4,11) заключаем, что разложение энергии ε вблизи особой точки $\tau = 0$ имеет член, пропорциональный $\tau \ln \tau$, а разложение теплоёмкости c имеет член, пропорциональный $\ln \tau$. Следовательно, энергия ε непрерывна при $T = T_0$, а теплоёмкость имеет логарифмическую особенность.

Мы убедились, что температура T_0 является температурой фазового перехода второго рода для бесконечно протяжённой плоской дипольной решётки.

Интеграл, входящий по формуле (4,6) в выражение для $\ln \lambda$, не выражается через известные функции. Однако, как показал Онсагер [2], интегралы, входящие в формулы (4,2), для энергии ε и теплоёмкость c выражаются через эллиптические интегралы. Приведём это преобразование для случая изотропной решётки $\theta = \theta'$. Имеем по формулам (1,16), (4,2) и (4,3):

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon &= -\frac{I_2 - I_1}{2} \frac{d \ln \lambda}{d\theta}, \\ \frac{d \ln \lambda(\theta)}{d\theta} &= \operatorname{cth} 2\theta + \frac{1}{\pi} \int\limits_0^{\pi} \frac{d\gamma(\omega)}{d\theta}\, d\omega. \end{aligned}\right\} \tag{4,12}$$

Принимая во внимание формулы (1,34) и (4,4), имеем при $\theta = \theta'$

$$\operatorname{ch} 2\gamma(\omega) = \operatorname{ch} 2\theta \operatorname{cth} 2\theta - \cos \omega. \tag{4,13}$$

Обозначая

$$\operatorname{ch} 2\theta \operatorname{cth} 2\theta = \frac{2}{k}, \tag{4,14}$$

вычисляем:

$$\frac{d\gamma(\omega)}{d\theta} = \frac{2\left(\operatorname{ch} 2\theta - \frac{1}{k} \operatorname{cth} 2\theta\right)}{\sqrt{\left(\frac{2}{k} - \cos \omega\right)^2 - 1}}. \tag{4,15}$$

Подставляя (4,15) в (4,12), получаем после обычного преобразования:

$$\varepsilon = -\frac{(I_2 - I_1)}{2}\left\{\operatorname{cth} 2\theta + \frac{(4 \operatorname{th} 2\theta - 2 \operatorname{cth} 2\theta)}{\pi}\int_0^{\pi/2}\frac{d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2\varphi}}\right\}. \quad (4,16)$$

В общем случае неизотропной решётки эллиптические интегралы становятся значительно сложнее (см. (2) в приложении).

§ 5. ДАЛЬНИЙ ПОРЯДОК

Мы показали, что функция распределения $Z(T)$ для плоской решётки выражается через собственные значения матрицы $\hat{P}$.

Возникает вопрос о том, какой физический смысл имеют недиагональные элементы этой матрицы:

$$\left(\nu' \middle| \hat{P} \middle| \nu\right) = \exp\left(-\frac{V_1(\nu') + V_2(\nu', \nu)}{kT}\right). \quad (5,1)$$

Для того чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим решётку, состоящую только из двух столбцов. Пусть нулевой столбец имеет конфигурацию ν^0. Тогда по принципу Больцмана зависящая от ν^0 вероятность $w^{(1)}(\nu', \nu^0)$ того, что первый столбец будет иметь конфигурацию ν', будет

$$w^{(1)}(\nu', \nu^0) = C^{(1)} \exp\left(-\frac{V_1(\nu') + V_2(\nu', \nu^0)}{kT}\right) =$$

$$= C^{(1)}\left(\nu' \middle| \hat{P} \middle| \nu^0\right), \quad (5,2)$$

где $C^{(1)}$ — нормирующий множитель, определяемый из требования

$$\sum_{(\nu')} w^{(1)}(\nu', \nu^0) = 1$$

и равный

$$C^{(1)} = \frac{1}{\sum\limits_{(\nu')}\left(\nu' \middle| \hat{P} \middle| \nu^0\right)}. \quad (5,3)$$

Итак, матричный элемент $\left(\nu' \middle| \hat{P} \middle| \nu^0\right)$ пропорционален вероятности $w^{(1)}(\nu', \nu^0)$.

Далее рассмотрим решётку, состоящую из трёх столбцов. По теоремам умножения и сложения вероятностей находим для вероятности $w^{(2)}(\nu'', \nu^0)$ того, что второй столбец будет иметь конфигурацию ν'', при условии, что нулевой имеет конфигурацию ν^0,) выражение

$$w^{(2)}(\nu'', \nu^0) = \sum_{(\nu')} w^{(1)}(\nu'', \nu')\, w^{(1)}(\nu', \nu^0) = C^{(2)}\left(\nu'' \,\middle|\, \hat{P}^2 \,\middle|\, \nu^0\right), \quad (5,4)$$

где нормирующий множитель $C^{(2)}$ определяется из требования $\sum_{(\nu'')} w^{(2)}(\nu'', \nu^0) = 1$ и равен

$$C^{(2)} = \frac{1}{\sum\limits_{(\nu'')} \left(\nu'' \,\middle|\, \hat{P}^2 \,\middle|\, \nu^0\right)}. \quad (5,5)$$

Продолжая таким же образом, мы приходим к общей формуле, выражающей вероятность $w^{(k)}(\nu^{(k)}, \nu^0)$ того, что k-й столбец будет иметь конфигурацию $\nu^{(k)}$, при условии, что нулевой столбец имеет конфигурацию ν^0:

$$w^{(k)}(\nu^{(k)}, \nu^0) = \frac{\left(\nu^{(k)} \,\middle|\, \hat{P}^k \,\middle|\, \nu^0\right)}{\sum\limits_{(\nu^{(k)})} \left(\nu^{(k)} \,\middle|\, \hat{P}^k \,\middle|\, \nu^0\right)}. \quad (5,6)$$

Связь изложенного с теорией дискретных цепей Маркова очевидна, поскольку $w(\nu'', \nu')$ являются элементами 2^n-рядной стохастической матрицы.

По определению мы говорим, что в решётке имеется дальний порядок, если вероятность конфигурации $\nu^{(k)}$ на k-м столбце продолжает зависеть от конфигурации ν^0 на нулевом столбце при $k \to \infty$. Если эта зависимость в пределе исчезает, то мы говорим, что имеется только ближний порядок.

Для выяснения критерия существования дальнего порядка мы должны преобразовать выражение (5,6), в котором матрица $\hat{P}$ задана нам в представлении, соответствующем диагональности $\hat{A}_k$, к выражению, в котором диагональна матрица $\hat{P}$.

Пусть формулы для перехода от собственных векторов ν^k матриц $\hat{A}_k$ к собственным векторам $\psi(E)$ матрицы $\hat{P}$ имеют вид:

$$\nu^{(k)} = \sum_{(E)} C(\nu^{(k)}, E)\, \psi(E). \quad (5,7)$$

Отметим, что поскольку матрица $\hat{P} = \hat{P}_1 \hat{P}_2$ несимметрична, система векторов $\psi(E)$ не будет ортогональной.

Тогда имеем для (5,6) выражение

$$w^{(k)}\left(\nu^{(k)}, \nu^0\right) = \frac{\sum\limits_{(E)} E^k C\left(\nu^{(k)}, E\right) C\left(\nu^0, E\right)}{\sum\limits_{(\nu^k)} \sum\limits_{(E)} E^k C\left(\nu^{(k)}, E\right) C\left(\nu^0, E\right)}, \qquad (5,8)$$

где суммирование $\sum\limits_{(E)}$ происходит по всем собственным значениям матрицы $\hat{P}$. При больших значениях k это выражение асимптотически переходит в

$$\lim_{k \to \infty} w^{(k)}\left(\nu^{(k)}, \nu^0\right) = \frac{E^k_{\text{макс}} C\left(\nu^{(k)}, E_{\text{макс}}\right) C\left(\nu^0, E_{\text{макс}}\right)}{E^k_{\text{макс}} \sum\limits_{(\nu^{(k)})} C\left(\nu^{(k)}, E_{\text{макс}}\right) C\left(\nu^0, E_{\text{макс}}\right)}, \qquad (5,9)$$

и мы видим, что зависимость от ν^0 выпадает, если наибольшее собственное значение матрицы $\hat{P}$ не вырождено.

Иначе обстоит дело в случае двукратного вырождения наибольшего собственного значения. Обозначая оба вырожденных собственных значения через $E_1 = E_2 = E_{\text{макс}}$, получаем в этом случае из (5,8) асимптотически:

$$\lim_{\to \infty} w^{(k)}\left(\nu^{(k)}, \nu^0\right) =$$

$$= \frac{C\left(\nu^{(k)}, E_1\right) C\left(\nu^0, E_1\right) + C\left(\nu^{(k)}, E_2\right) C\left(\nu^0, E_2\right)}{\sum\limits_{(\nu^k)} \left(C\left(\nu^k, E_1\right) C\left(\nu^0, E_1\right) + C\left(\nu^{(k)}, E_2\right) C\left(\nu^0, E_2\right)\right)}, \qquad (5,10)$$

т. е. в пределе $k \to \infty$ вероятность продолжает зависеть от конфигурации ν^0.

Мы показали, следуя работе [7], что при низких температурах $T < T_0$, когда наибольшее собственное значение асимптотически двукратно вырождено, существует дальний порядок. При $T > T_0$ это вырождение снимается и дальний порядок исчезает. Итак, фазовый переход второго рода связан с исчезновением дальнего порядка.

§ 6. ПЛОСКАЯ РЕШЁТКА ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Обобщим теперь наше рассмотрение учётом внешнего поля, направленного перпендикулярно к плоскости решётки. Каждый диполь относительно внешнего поля F может принять две противоположные ориентации. Энергия конфигурации $E(\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_n)$ по формуле (1,6) получит дополнительный член $\Delta E(\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_n)$, зависящий от напряжённости поля F:

$$\Delta E(\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_n) = \prod_{k=1}^{k=m} V_0(\nu_k);$$

$$V_0(\nu) = -p_0 F \sum_{k=1}^{k=n} \sigma_k, \tag{6,1}$$

где через p_0 обозначен момент диполя. Функция распределения по формуле (1,6) запишется в виде

$$Z(T) = \sum_{(\nu_1)} \sum_{(\nu_2)} \ldots \sum_{(\nu_m)} \prod_{k=1}^{k=m} \exp\left(\frac{-V_0(\nu_k)}{kT}\right) \exp\left(\frac{-V_1(\nu_k)}{kT}\right) \times$$
$$\times \exp\left(\frac{-V_2(\nu_k, \nu_{k+1})}{kT}\right). \tag{6,2}$$

Если дополнительно к прежним матрицам $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ ввести матрицу $\hat{P}_0$:

$$\hat{P}_0 = \prod_{k=1}^{k=n} \exp\left(\beta \hat{A}_k\right), \tag{6,3}$$

где $\beta = \frac{p_0 F}{kT}$, то функция распределения в присутствии внешнего поля может быть записана как

$$Z(T, \beta) = \mathrm{Sp}\left(\hat{P}_0 \hat{P}_1 \hat{P}_2\right)^m \tag{6,4}$$

и дело опять сводится к вычислению собственных значений некоторой 2^n-рядной матрицы $\hat{P}_0 \hat{P}_1 \hat{P}_2$. Зная функцию распределения $Z(T, \beta)$, мы можем вычислить средний момент диполя $\langle p \rangle$ по формуле

$$\langle p \rangle = \frac{p_0}{mn} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(T, \beta). \tag{6,5}$$

Если мы будем считать число столбцов m в решётке большим, то (6,5) приближённо может быть записано в виде

$$\langle p\rangle = \frac{p_0}{n}\frac{\partial}{\partial\beta}\ln E_{\text{макс}}(\beta), \tag{6,5'}$$

где $E_{\text{макс}}(\beta)$ — максимальное собственное значение матрицы $\hat{P}_0\hat{P}_1\hat{P}_2$.

В общем случае задача определения собственных значений матрицы $\hat{P}_0\hat{P}_1\hat{P}_2$ или по крайней мере её максимального собственного значения $E_{\text{макс}}(\beta)$ до сих пор не решена. Методы, которыми мы пользовались раньше, неприменимы, поскольку матрица $\hat{P}_0 = \prod_{k=1}^{k=n}\exp\left(\beta\hat{A}_k\right)$ не может быть представлена как оператор вращения в $2n$-мерном пространстве.

Однако, пользуясь методами теории возмущения, оказывается возможным найти выражение для среднего момента $\langle p\rangle$ при исчезающей величине напряжённости внешнего поля.

Для этого разложим матрицу $\hat{P}_0\hat{P}_1\hat{P}_2$ по степеням β и получим:

$$\hat{P}_0\hat{P}_1\hat{P}_2 = \hat{P}_1\hat{P}_2 + \beta\left(\Sigma\,\hat{A}_k\right)\hat{P}_1\hat{P}_2 + \cdots \tag{6,6}$$

Нам удобнее иметь в теории возмущений дело с симметричной невозмущённой матрицей, поскольку в этом случае система собственных векторов окажется ортогональной. Поэтому совершим в (6,6) преобразование подобия:

$$\hat{P}_2^{1/2}\left(\hat{P}_0\hat{P}_1\hat{P}_2\right)\hat{P}_2^{-1/2} = \hat{P}_2^{1/2}\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2} + \beta\hat{P}_2^{1/2}\left(\Sigma\,\hat{A}_k\right)\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2}. \tag{6,7}$$

Найдём возмущённое значение максимального собственного значения $E_{\text{макс}}(0)$ невозмущённой матрицы $\hat{P}_2^{1/2}\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2}$.

Обозначая через Ψ собственный вектор невозмущённой матрицы, соответствующей этому терму, имеем по общим правилам теории возмущения:

$$E_{\text{макс}}(\beta) = E_{\text{макс}}(0) + \beta\sum_{k=1}^{k=n}\left(\Psi\left|\hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2}\right|\Psi\right). \tag{6,8}$$

Поскольку Ψ является одновременно собственным вектором матрицы $\hat{U}$, имеем:

$$\hat{U}\Psi = \Psi. \tag{6,9}$$

Подставляя (6,9) в (6,8), имеем, поскольку $\hat{U}$ коммутирует с $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ и антикоммутирует со всеми $\hat{A}_k$:

$$\left(\Psi \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2} \right| \Psi\right) = \left(\Psi \left| \hat{U}\hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2}\hat{U} \right| \Psi\right) = \\ = -\left(\Psi \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2} \right| \Psi\right) = 0, \quad (6,10)$$

и, следовательно, в первом приближении теории возмущения $E_{\text{макс}}(\beta)$ не зависит от β. По формуле (6,5′) отсюда следует, что $\langle p \rangle = 0$.

Иначе обстоит дело, если максимальное собственное значение $E^+_{\text{макс}}(0) = E^-_{\text{макс}}(0)$ двукратно вырождено при $n \to \infty$. В этом случае возмущение снимает вырождение, и терм расщепляется. По общим правилам теории возмущения имеем для расщеплённых термов:

$$E^+_{\text{макс}}(\beta) = E_{\text{макс}}(0) + \beta \sum_k \left(\frac{\Psi^+ + \Psi^-}{\sqrt{2}} \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2} \right| \frac{\Psi^+ + \Psi^-}{\sqrt{2}} \right) = \\ = E_{\text{макс}}(0) + \beta \sum_k \left(\Psi^- \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2} \right| \Psi^+ \right),$$

$$E^-_{\text{макс}}(\beta) = E_{\text{макс}}(0) + \beta \sum_k \left(\frac{\Psi^+ - \Psi^-}{\sqrt{2}} \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2} \right| \frac{\Psi^+ - \Psi^-}{\sqrt{2}} \right) = \\ = E_{\text{макс}}(0) - \beta \sum_k \left(\Psi^- \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2} \right| \Psi^+ \right). \quad (6,11)$$

Принимая во внимание

$$\left(\hat{P}_2^{1/2}\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2}\right)\Psi^+ = E_{\text{макс}}(0)\Psi^+,$$

получаем:

$$E^+_{\text{макс}}(\beta) = E_{\text{макс}}(0)\left\{1 + \beta \sum_k \left(\Psi^- \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_2^{-1/2} \right| \Psi^+ \right)\right\},$$

$$\ln E^+_{\text{макс}}(\beta) = \ln E_{\text{макс}}(0) + \beta \sum_k \left(\Psi^- \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_k\hat{P}_2^{-1/2} \right| \Psi^+ \right). \quad (6,12)$$

Замечая, что матрица $P_2^{1/2}$ циклична в индексах и что, следовательно, все n членов в последней сумме равны, мы можем по формуле (6,5) записать:

$$\langle p \rangle = p_0 \left(\Psi^- \left| \hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_1\hat{P}_2^{-1/2} \right| \Psi^+ \right). \quad (6,13)$$

Имеем:

$$\hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_1 = \hat{A}_1 e^{-\theta^* \hat{B}_1}\hat{P}_2^{1/2}$$

и, следовательно:

$$\hat{P}_2^{1/2}\hat{A}_1\hat{P}_2^{-1/2} = \hat{A}_1 e^{-\theta^* \hat{B}_1} = \hat{A}_1\left(\operatorname{ch}\theta^* - \hat{B}\operatorname{sh}\theta^*\right) =$$

$$= \hat{A}_1 \operatorname{ch}\theta^* - i\hat{C}_1 \operatorname{sh}\theta^*. \tag{6,14}$$

Подставляя в (6,13), получаем:

$$\langle p\rangle = p_0\left\{\operatorname{ch}\theta^*\left(\Psi^-\left|\hat{A}_1\right|\Psi^+\right) - i\operatorname{sh}\theta^*\left(\Psi^-\left|\hat{C}_1\right|\Psi^+\right)\right\}. \tag{6,13'}$$

Принципиально речь идёт о следующем: даны выражения матриц $\hat{A}_1$ и $\hat{C}_1$ в представлении, в котором диагональна $\hat{A}_1$; требуется их записать в представлении, в котором диагональна матрица $\hat{P}_2^{1/2}\hat{P}_1\hat{P}_2^{1/2}$. Однако вычисления оказываются очень трудоёмкими, поскольку явные выражения для собственных векторов Ψ^+ и Ψ^- очень сложные. Янгу[8] удалось преодолеть эту трудность путём очень сложных расчётов. Поскольку результат оказывается простым, следует думать, что существует более простой способ вычисления, пока ещё не найденный.

По Янгу имеем (в случае изотропной решётки $\theta = \theta'$):

$$\left(\Psi^-\left|\hat{A}_1\right|\Psi^+\right) = \frac{1}{\operatorname{ch}\theta^*}\sqrt[8]{1-\operatorname{sh}^4 2\theta^*},$$

$$\left(\Psi^-\left|\hat{C}_1\right|\Psi^+\right) = 0,$$

? где поле

и, следовательно, окончательно:

$$\langle p\rangle = p_0\sqrt[8]{1-\operatorname{sh}^4 2\theta^*} \qquad \theta^* < \theta \quad (T < T_0),$$

$$\langle p\rangle = 0, \qquad \theta^* > \theta \quad (T > T_0).$$

Мы видим, что исчезновение спонтанного момента при температуре $T > T_0$ связано с исчезновением дальнего порядка, что в свою очередь связано со снятием двукратного квазивырождения у максимального терма матрицы распределения.

§ 7. БИНАРНАЯ ПЛОСКАЯ РЕШЁТКА

Рассмотрим плоскую квадратичную решётку, состоящую из атомов двух сортов, расположенных в её узлах. Функцию распределения запишем в виде

$$Z(T) = \sum_{N=n_1+n_2}\ \sum_{(\nu)} \exp\left(n_1\zeta_1 + n_2\zeta_2 - E(\nu)\right)/kT, \tag{7,1}$$

где n_1 и n_2 обозначают числа атомов различных сортов, переменное ν нумерует всевозможные конфигурации атомов в решётке, ζ_1 и ζ_2 — химические потенциалы, E — зависящая от конфигураций атомов в решётке их энергия взаимодействия.

Припишем каждому узлу (i) дискретную переменную σ_i, способную принимать два значения: $\sigma_i = +1$, если узел занят атомом первого сорта, и $\sigma_i = -1$, если он занят атомом второго сорта. Имеем:

$$\left.\begin{aligned} n_1 &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{i=N}(1+\sigma_i), \\ n_2 &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{i=N}(1-\sigma_i). \end{aligned}\right\} \tag{7,2}$$

Если (i) и (k) обозначают два соседних узла в решётке, то энергия взаимодействий $V(\sigma_i, \sigma_k)$ между двумя атомами может быть записана в виде

$$\begin{aligned} V(\sigma_i, \sigma_k) = \frac{1}{4} I_{11}(1+\sigma_i)(1+\sigma_k) &+ \\ + \frac{1}{4} I_{22}(1-\sigma_i)(1-\sigma_k) &+ \frac{1}{2} I_{12}(1-\sigma_i\sigma_k), \end{aligned} \tag{7,3}$$

где I_{11} — энергия взаимодействия между двумя соседними атомами первого сорта, I_{22} — энергия взаимодействия между двумя соседними атомами второго сорта, I_{12} — энергия взаимодействия между двумя соседними атомами различных сортов.

Введём символ a_{ik}, определяемый следующим образом:

$$\left.\begin{aligned} a_{ik} &= 1, \text{ если } i \text{ и } k \text{ — соседние узлы}, \\ a_{ik} &= 0 \text{ во всех других случаях}. \end{aligned}\right\} \tag{7,4}$$

Очевидно, что $\sum\limits_{k=1}^{k=N} a_{ik}$ есть число ближайших соседей данного узла, равное для квадратичной решётки четырём.

Тогда энергия взаимодействия $E(\nu)$ может быть записана в виде

$$E(\nu) = \frac{1}{2}\sum_{i,\,k} a_{ik} V(\sigma_i \sigma_k). \tag{7,5}$$

Подставляя выражения (7,2) — (7,5) в (7,1), получаем:

$$Z(T) = \sum_{(\sigma_1)}\sum_{(\sigma_2)}\ldots\sum_{(\sigma_N)} [n_1\zeta_1 + n_2\zeta_2 - E(\nu)]/kT, \tag{7,6}$$

где суммирования по всем $n_1 + n_2 = N$ и ν заменено эквивалентным суммированием по всем значениям переменных

$$\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N.$$

Имеем:

$$n_1\zeta_1 + n_2\zeta_2 - E(\nu) = \frac{N}{2}[\zeta_1 + \zeta_2 - I_{11} - I_{22} - 2I_{12}] + \frac{1}{2}[\zeta_1 + \zeta_2 - 2I_{11} + 2I_{22}]\sum_{k=1}^{k=N}\sigma_k - \frac{1}{4}(I_{11} + I_{22} - 2I_{12})\frac{1}{2}\sum_{i,k} a_{ik}\sigma_i\sigma_k. \tag{7,7}$$

Обозначим:

$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{2kT}(\zeta_1 + \zeta_2 - 2I_{11} + 2I_{22}) &= \beta, \\ -\frac{1}{4kT}(I_{11} + I_{22} - 2I_{12}) &= \theta, \\ \frac{1}{2kT}(\zeta_1 + \zeta_2 - I_{11} - I_{22} - 2I_{12}) &= \theta_0 \end{aligned}\right\} \tag{7,8}$$

и получим:

$$Z(T) = \exp N\theta_0 \sum_{(\sigma_1)}\sum_{(\sigma_2)}\ldots\sum_{(\sigma_N)}\prod_{k=1}^{k=N}\exp(\beta\sigma_k)\prod_{i,k}\exp\left(\frac{\theta}{2}a_{ik}\sigma_i\sigma_k\right). \tag{7,9}$$

Несущественный множитель $\exp N\theta_0$ может быть отброшен, и мы получаем функцию распределения в виде

$$Z(T) = \sum_{(\sigma_1)}\sum_{(\sigma_2)}\ldots\sum_{(\sigma_N)}\prod_{k=1}^{N}\exp(\beta\sigma_k)\prod_{i,k}^{N}\exp\left(\frac{\theta}{2}a_{ik}\sigma_i\sigma_k\right). \tag{7,10}$$

Она может быть записана как след

$$Z(T) = \mathrm{Sp}(\hat{P}_0\hat{P}_1\hat{P}_2)^m, \tag{7,10'}$$

где матрица распределения даётся формулой

$$\hat{P}_0\hat{P}_1\hat{P}_2 =$$

$$= (2\operatorname{sh}2\theta)^{n/2}\prod_{k=1}^{n}\exp(\beta\hat{A}_k) \times \prod_{k=1}^{k=n}\exp(\theta\hat{A}_k\hat{A}_{k+1})\prod_{k=1}^{k=n}\exp(\theta^*\hat{B}_k). \tag{7,11}$$

Мы видим, что задача о плоской бинарной решётке эквивалентна рассмотренной ранее задаче о плоской решётке во внешнем поле ($\beta \neq 0$).

Вычисляя средние по формулам (7,2), находим:

$$\left.\begin{aligned} N_1 &= \langle n_1 \rangle = \frac{N}{2}(1 + \langle \sigma \rangle), \\ N_2 &= \langle n_2 \rangle = \frac{N}{2}(1 - \langle \sigma \rangle). \end{aligned}\right\} \tag{7,12}$$

Но матрица распределения $\hat{P}$ при $\beta = 0$ инвариантна при замене σ_i на $-\sigma_i$ и, следовательно, в этом случае

$$\langle \sigma \rangle = 0,$$

откуда

$$N_1 = N_2 = N/2.$$

Итак, задача о бинарной решётке с одинаковым числом атомов обоих сортов эквивалентна задаче о плоской дипольной решётке в отсутствии внешнего поля.

ПРИЛОЖЕНИЕ

1. ПРЯМАЯ СУММА И ПРЯМОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ МАТРИЦ

Пусть даны n-рядная матрица $\hat{A}$ и m-рядная матрица $\hat{B}$.

Прямой суммой матриц $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называется $(n+m)$-рядная матрица

$$\hat{A} \dot{+} \hat{B} = \begin{pmatrix} \hat{A} & 0 \\ 0 & \hat{B} \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Так как

$$\hat{B} \dot{+} \hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{B} & 0 \\ 0 & \hat{A} \end{pmatrix}, \tag{1'}$$

то прямая сумма некоммутативна. Из определения легко вытекают следующие свойства прямой суммы:

$$\left.\begin{aligned} (\hat{A} \dot{+} \hat{B}) \dot{+} \hat{C} &= \hat{A} \dot{+} (\hat{B} \dot{+} \hat{C}), \\ (\hat{A}_1 \dot{+} \hat{B}_1)(\hat{A}_2 \dot{+} \hat{B}_2) &= \hat{A}_1 \hat{A}_2 \dot{+} \hat{B}_1 \hat{B}_2, \\ \mathrm{Sp}\,(\hat{A} \dot{+} \hat{B}) &= \mathrm{Sp}\,\hat{A} + \mathrm{Sp}\,\hat{B}, \\ \mathrm{Det}\,(\hat{A} \dot{+} \hat{B}) &= \mathrm{Det}\,\hat{A} \cdot \mathrm{Det}\,\hat{B}. \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

Прямым произведением матриц $\hat{A}$ и $\hat{B}$ называется mn-рядная матрица

$$\hat{A} \times \hat{B} = \begin{pmatrix} AB_{11} & \ldots & AB_{1m} \\ AB_{m1} & & AB_{mm} \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Так как

$$\hat{B} \times \hat{A} = \begin{pmatrix} BA_{11} & \ldots & BA_{1n} \\ BA_{n1} & & BA_{nn} \end{pmatrix}, \tag{3'}$$

то прямое произведение некоммутативно. Из определения легко вытекают следующие свойства прямого произведения:

$$\begin{gathered} (\hat{A} \times \hat{B}) \times \hat{C} = \hat{A} \times (\hat{B} \times \hat{C}), \\ (\hat{A}_1 \times \hat{B}_1)(\hat{A}_2 \times \hat{B}_2) = \hat{A}_1 \hat{A}_2 \times \hat{B}_1 \hat{B}_2, \\ \mathrm{Sp}\,(\hat{A} \times \hat{B}) = \mathrm{Sp}\,\hat{A} \cdot \mathrm{Sp}\,\hat{B}, \\ \mathrm{Det}\,(\hat{A} \times \hat{B}) = (\mathrm{Det}\,\hat{A})^n (\mathrm{Det}\,\hat{B})^m. \end{gathered} \tag{4}$$

При преобразовании подобия

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}' &= \hat{S}_1^{-1} \hat{A} \hat{S}_1; \\ B' &= \hat{S}_2^{-1} \hat{B} \hat{S}_2 \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

прямые суммы и прямое произведение преобразуются по формулам:

$$\begin{aligned} \hat{A}' \dot{+} \hat{B}' &= (\hat{S}_1^{-1} \hat{A} \hat{S}_1) \dot{+} (\hat{S}_2^{-1} \hat{B} \hat{S}_2) = \\ &= (\hat{S}_1^{-1} \dot{+} \hat{S}_2^{-1}) (\hat{A} \dot{+} \hat{B}) (\hat{S}_1 \dot{+} \hat{S}_2), \\ \hat{A}' \times \hat{B}' &= (\hat{S}_1^{-1} \hat{A} \hat{S}_1) \times (\hat{S}_2^{-1} \hat{B} \hat{S}_2) = \\ &= (\hat{S}_1^{-1} \times \hat{S}_2^{-}) (\hat{A} \times \hat{B}) (\hat{S}_1 \times \hat{S}_2). \end{aligned} \tag{6}$$

Следовательно, если преобразования $\hat{S}_1$ и $\hat{S}_2$ приводят матрицы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ к диагональному виду, то преобразования $\hat{S}_1 \dot{+} \hat{S}_2$ и $\hat{S}_1 \times \hat{S}_2$ приводят к диагональному виду матрицы $\hat{A} \dot{+} \hat{B}$ и $\hat{A} \times \hat{B}$.

2. ПРИВЕДЕНИЕ КОМПЛЕКСНОЙ $2n$-РЯДНОЙ ОРТОГОНАЛЬНОЙ МАТРИЦЫ $\hat{L}$ К ПРЯМОЙ СУММЕ ДВУХРЯДНЫХ ОРТОГОНАЛЬНЫХ МАТРИЦ

Элементы ортогональной комплексной матрицы $\hat{L}$ удовлетворяют условиям:

$$L_{\alpha\beta} = L_{\beta\alpha}^{-1} . \tag{7}$$

Пусть ψ и φ — два собственных комплексных вектора матрицы $\hat{L}$, принадлежащие комплексным собственным значениям λ и μ:

$$\sum_{(\sigma)} L_{\alpha\sigma}\psi_\sigma = \lambda\psi_\alpha ; \qquad \sum_{(\sigma)} L_{\alpha\sigma}\varphi_\sigma = \mu\varphi_\alpha . \tag{8}$$

Принимая во внимание (7), отсюда следует:

$$\sum_{\alpha} \psi_\alpha L_{\alpha\sigma} = \frac{1}{\lambda}\psi_\sigma ; \qquad \sum_{\alpha} \varphi_\alpha L_{\alpha\sigma} = \frac{1}{\mu}\varphi_\sigma . \tag{8$'$}$$

Из (8) и (8$'$) выводим:

$$(\varphi_\alpha L_{\alpha\sigma}\psi_\sigma) - (\psi_\alpha L_{\alpha\sigma}\varphi_\sigma) = (\lambda - \mu)\cdot(\psi_\alpha \varphi_\alpha) =$$
$$= \left(\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\lambda}\right)(\psi_\alpha \varphi_\alpha) = \frac{\lambda - \mu}{\lambda\mu}(\varphi_\alpha \psi_\alpha), \tag{9}$$

откуда следует, что либо векторы ψ и φ ортогональны, либо $\lambda\mu = 1$.

Итак, комплексные собственные значения и им соответствующие комплексные собственные векторы распадаются на n пар

$$\left(\lambda_1, \frac{1}{\lambda_1}\right), \qquad \left(\lambda_2, \frac{1}{\lambda_2}\right), \ldots, \left(\lambda_n, \frac{1}{\lambda_n}\right), \tag{10}$$

$$\psi_1, \varphi_1; \qquad \psi_2, \varphi_2, \ldots, \psi_n, \varphi_n, \tag{10$'$}$$

лежащих в ортогональных друг другу n плоскостях:

$$\left.\begin{aligned} (\psi_m \psi_n) &= 0; \\ (\varphi_m \varphi_n) &= 0; \\ (\psi_m \varphi_n) &= 0; \\ (\psi_n \varphi_n) &\neq 0. \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

Обозначая:

$$\left.\begin{aligned} \lambda_k &= \exp \Lambda_k, \\ \psi_k &= x_k + iyk, \\ \varphi_k &= x_k - iyk, \end{aligned}\right\} \tag{12}$$

где Λ_k, x_k, y_k — комплексные, получаем:

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}\, x_k &= x_k \cos(i\Lambda_k) + y_k \sin(i\Lambda_k), \\ \hat{L}\, y_k &= -x_k \sin(i\Lambda_k) + y_k \cos(i\Lambda_k), \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

откуда следует, что любая комплексная 2^n-рядная ортогональная матрица может быть представлена как прямая сумма из n двухрядных матриц

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} \cos i\Lambda_1, & \sin i\Lambda_1 \\ -\sin i\Lambda_1, & \cos i\Lambda_1 \end{pmatrix} \dot{+} \ldots \dot{+} \begin{pmatrix} \cos i\Lambda_n, & \sin i\Lambda_n \\ -\sin i\Lambda_n, & \cos i\Lambda_n \end{pmatrix}. \tag{14}$$

В действительной области разложение (14) соответствует разложению произвольного вращения в $2n$-мерном пространстве на последовательность коммутирующих вращений в n взаимно перпендикулярных плоскостях.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛА

$$2x = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \ln(\operatorname{ch} 2x - \cos\omega)\, d\omega + \ln 2.$$

Разлагая $2 \operatorname{sh} 2nx$ на простые множители, имеем:

$$2 \operatorname{sh} 2nx = (e^x)^{2n} - (e^{-x})^{2n} = \prod_{k=1}^{k=n} (e^x - \eta_k e^{-x})\left(e^x - \bar{\eta}_k e^{-x}\right), \tag{15}$$

где $\eta_k = \exp \frac{\pi i}{n}$ — корень $2n$-й степени из единицы. Имеем из (15):

$$2 \operatorname{sh} 2nx = \prod_{k=1}^{k=n} 2\left(\operatorname{ch} 2x - \cos\frac{\pi k}{n}\right). \tag{15'}$$

Логарифмируя, получаем:

$$\ln 2 + \ln \operatorname{sh} 2nx = n \ln 2 + \sum_{k=1}^{k=n} \ln\left(\operatorname{ch} 2x - \cos\frac{\pi k}{n}\right). \tag{16}$$

Переходя к пределу $n \to \infty$, получаем:

$$2x = \ln 2 + \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \ln(\operatorname{ch} 2x - \cos\omega)\, d\omega. \tag{16'}$$

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Ландау и Е. Лифшиц, Статистическая физика, Издание 2-е, § 59, 1951.
2. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
3. B. Kaufman, Phys. Rev. **76**, 1232 (1949).
4. F. Newell and E. Montroll, Rev. Mod. Physics **25**, **353** (1953).
5. А. Мальцев, Основы линейной алгебры, Гостехиздат, 1948, стр. 208 и сл.
6. В. Паули, Общие принципы волновой механики, Гостехиздат, 1945, стр. 244.
7. J. Ashkin and W. Lamb, Phys. Rev. **64**, 159 (1943).
8. C. N. Yang, Phys. Rev. **85**, 809 (1952). Подробный указатель литературы имеется в [4].