

ТЕРМОДИНАМИКА ПЛОСКОЙ ДИПОЛЬНОЙ РЕШЕТКИ ИЗИНГА — ОНСАГЕРА

А. М. Дыхне и Ю. Б. Румер

Термодинамика дипольной решетки представляет значительный интерес, так как это единственная модель системы, испытывающей фазовый переход второго рода, допускающая точное решение. Решение задачи дано в работах Онсагера¹ и Кауфман². Однако развитая ими методика принципиально не допускает обобщения на случай трехмерной решетки.

Обзор указанных работ был дан одним из авторов этой статьи (Ю. Р.) в 1954 г.³.

В самое последнее время появилась работа Харста и Грипа⁴, в которой имеются значительный прогресс и существенно новые идеи в подходе к задаче. Новый метод дает более простое, чем в работах^{1,2} решение, и, что самое главное, не исключает возможность его обобщения на трехмерную решетку. Поэтому мы сочли целесообразным изложить новую методику в виде обзора, который можно рассматривать как продолжение обзора³.

§ 1. СУММА СОСТОЯНИЙ

Пусть дана прямоугольная решетка, состоящая из m столбцов и n строк, содержащая $N = nm$ узлов. Перенумеруем узлы решетки в лексикологическом порядке, т. е. присвоим каждому узлу номер

$$k = (k_2 - 1)m + k_1, \quad 1 \leq k_1 \leq m, \quad 1 \leq k_2 \leq n, \quad (1)$$

где k_1 и k_2 — номера строки и столбца, в которых расположен данный узел.

Для устранения краевых эффектов наложим на решетку условие цикличности, замкнув ее 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 решетки поместим по диполь с осями, направленными перпендикулярно к плоскости решетки. Каждый из диполей может иметь одну из двух возможных взаимно противоположных ориентаций. Очевидно, что общее число возможных конфигураций диполей в решетке равно 2^N .

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

Если ограничиться только учетом энергии взаимодействия между ближайшими соседями и пренебречь взаимодействием между более удаленными диполями, то конфигурационная энергия $E(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ может быть представлена в виде

$$E(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = \sum_{k=1}^N (I_1 \sigma_k \sigma_{k+1} + I_2 \sigma_k \sigma_{k+m}). \quad (2)$$

Здесь $\pm I_1$ — энергия взаимодействия между двумя соседними диполями, находящимися в одной строке с одинаковой и противоположной ориентацией диполей соответственно. Аналогично через $\pm I_2$ обозначена энергия взаимодействия между двумя соседними диполями, паходящими в одном столбце. Для суммы состояний имеем выражение

$$\begin{aligned} Z(T) &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \exp \left[\frac{-E(\sigma_1, \dots, \sigma_N)}{T} \right] = \sum_{(\sigma)} \exp \left\{ - \sum_{k=1}^N (\theta_1 \sigma_k \sigma_{k+1} + \theta_2 \sigma_k \sigma_{k+m}) \right\} = \\ &= \sum_{(\sigma)} \prod_{k=1}^N \exp(-\theta_1 \sigma_k \sigma_{k+1}) \exp(-\theta_2 \sigma_k \sigma_{k+m}), \end{aligned} \quad (3)$$

где $\sum_{(\sigma)}$ означает суммирование по всем 2^N возможным конфигурациям диполей и введены обозначения

$$\theta_1 = \frac{I_1}{T}, \quad \theta_2 = \frac{I_2}{T}. \quad (4)$$

Приняв во внимание, что $\sigma_i^2 = 1$, получаем формулу

$$\exp \alpha \sigma_i \sigma_k = \operatorname{ch} \alpha + \sigma_i \sigma_k \operatorname{sh} \alpha = \frac{1 - \sigma_i \sigma_k \operatorname{th} \alpha}{(1 - \operatorname{th}^2 \alpha)^{1/2}}. \quad (5)$$

Воспользовавшись этой формулой и введя обозначения

$$x = \operatorname{th} \theta_1, \quad y = \operatorname{th} \theta_2,$$

мы можем переписать $Z(T)$ в виде

$$Z(x, y) = [(1-x^2)(1-y^2)]^{-\frac{N}{2}} \sum_{(\sigma)} \prod_{k=1}^N (1 - x \sigma_k \sigma_{k+1}) (1 - y \sigma_k \sigma_{k+m}). \quad (6)$$

§ 2. ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА

Произведение

$$G(x, y, \sigma_1, \dots, \sigma_N) = \prod_{k=1}^N (1 - x \sigma_k \sigma_{k+1}) (1 - y \sigma_k \sigma_{k+m}), \quad (7)$$

входящее в (6), является полиномом по переменным $x, y, \sigma_1, \dots, \sigma_N$. Поскольку G входит в (6) под знаком суммы по всем конфигурациям, не все члены полинома дадут отличный от нуля вклад в сумму состояний. Покажем, что отличный от нуля вклад дадут лишь те члены, которые содержат все переменные $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ в нулевой, второй или четвертой степенях. Очевидно, что это утверждение достаточно доказать для какой-либо одной выделенной переменной σ_i .

Выделим из G все множители, содержащие σ_i .

Очевидно, таких множителей будет четыре, и мы можем записать (6) в виде

$$\begin{aligned} Z(x, y) &= [(1-x^2)(1-y^2)]^{-\frac{N}{2}} \times \\ &\times \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}, \dots, \sigma_N} G^{(i)}(x, y, \sigma_1, \dots, \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}, \dots, \sigma_N) \times \\ &\times \sum_{\sigma_i} (1 - x \sigma_i \sigma_{i-1}) (1 - x \sigma_i \sigma_{i+1}) (1 - y \sigma_i \sigma_{i-m}) (1 - y \sigma_i \sigma_{i+m}), \end{aligned} \quad (8)$$

где через $G^{(i)}$ обозначена совокупность всех сомножителей, не содержащих переменной σ_i . Выполняя в (8) внутреннее суммирование по σ_i , убеждаемся в том, что отличный от нуля вклад в $Z(x, y)$ дают лишь те члены полинома G , которые содержат σ_i в нулевой, второй и четвертой степенях. Проведенное рассуждение, очевидно, справедливо для всех переменных σ_i .

Поскольку $\sigma_i^2 = 1$, то каждый член полинома, содержащий все переменные $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ в четных степенях после суммирования по всем конфигурациям дает вклад, пропорциональный полному числу конфигураций 2^N .

Мы приходим к диаграммной технике, замечая, что каждому члену полинома $G(x, y, \sigma_1, \dots, \sigma_N)$ можно однозначно поставить в соответствие совокупность линий, соединяющих некоторые пары соседних узлов решетки.

Так, например, графикам, изображенным на рис. 1, а—е, соответствуют члены полинома:

- а) $\sigma_k \sigma_{k+1} \sigma_{k+m+1}$,
- б) $\sigma_k^2 \sigma_{k+1}^2 \sigma_{k+m}^2 - \sigma_{k+m}^2 \sigma_{k+1}^2 \sigma_{k+2m}^2 - \sigma_{k+2m}^2 \sigma_k^2 - \sigma_{k+2m}^2$,
- в) $\sigma_k^2 \sigma_{k+1}^2 \sigma_{k+m}^2 - 2\sigma_{k+m}^2 \sigma_k^2 + \sigma_{k+m}^2 \sigma_{k+1}^2 \sigma_{k+2m}^2 - 2\sigma_{k+2m}^2 \sigma_k^2 + \sigma_{k+3m}^2 - 2\sigma_{k+3m}^2 - 1$.

Как показывает формула (7), каждой горизонтальной линии сопоставляется множитель x , а каждой вертикальной y .

Мы доказали выше, что отличный от нуля вклад в сумму состояний дают лишь те члены полинома G , которые содержат переменные $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ в нулевой, второй и четвертой степенях.

Геометрически это означает, что из всей совокупности возможных графиков отличный от нуля вклад в сумму состояний дают лишь те, у которых в каждом узле решетки встречаются нуль, две или четыре линии

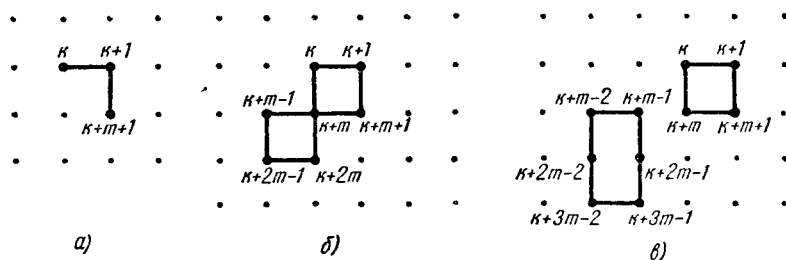


Рис. 1.

Простейшие примеры таких графиков изображены на рис. 1, б и в. Таким образом, все графики, дающие отличный от нуля вклад должны быть замкнутыми, причем в некоторых узлах возможно однократное самопересечение. (Узел $k+m$ на рис. 1, б.)

Таким образом, сумма состояний может быть представлена в следующем виде:

$$Z(x, y) = 2^N [(1-x^2)(1-y^2)]^{-\frac{N}{2}} S(x, y), \quad (9)$$

$$S(x, y) = \sum_{\alpha, \beta} g_{\alpha\beta} x^\alpha y^\beta, \quad (10)$$

где $g_{\alpha\beta}$ — число замкнутых графиков, составленных из α горизонтальных и β вертикальных линий, причем при подсчете всякий многосвязный график считается за один (например, график на рис. 1, в).

§ 3. ВВЕДЕНИЕ ФЕРМИ-ОПЕРАТОРОВ

Для вычисления суммы $S(x, y)$ по формуле (10) введем для каждого узла решетки две пары Ферми-операторов a_i^+ , a_i и b_i^+ , b_i , удовлетворяющих соотношениям

$$a_k^+ a_i + a_i a_k^+ = \delta_{ik}, \quad b_k^+ b_i + b_i b_k^+ = \delta_{ik}. \quad (11)$$

(Все остальные антикоммутаторы равны нулю.)

Вычислим выражение

$$S^*(x, y) = \text{Sp} \prod_k (1 + 4xy a_{k+1} b_{k+m} a_k^+ b_k^+ + 4xy a_k^+ b_k^+ + a_{k+1} b_{k+m} + 2x a_k^+ b_{k+m} + 2y b_k^+ a_{k+1} + 2x a_{k+1} a_k^+ + 2y b_{k+m} b_k^+) \quad (12)$$

и докажем, что $S^*(x, y) = S(x, y)$.

Отметим, что для удобства здесь и везде в дальнейшем символом $\text{Sp } C$ обозначена величина $\text{Sp } C / \text{Sp } E$, где E — единичная матрица размерности C . При такой записи размерность матриц, входящих под знак шпура, не сказывается на результатах.

Раскроем стоящее под знаком шпура произведение и соберем члены при одинаковых степенях $2x$ и $2y$. Мы получим:

$$S^*(x, y) = \sum_{\alpha, \beta} (2x)^\alpha (2y)^\beta \text{Sp} \sum_{\lambda} f_{\alpha\beta}^{(\lambda)}, \quad (13)$$

где под знаком шпура стоят суммы различных произведений Ферми-операторов a_k^+ , a_k и b_j^+ , b_j .

Для обозначения структуры этих произведений удобно опять воспользоваться диаграммной техникой.

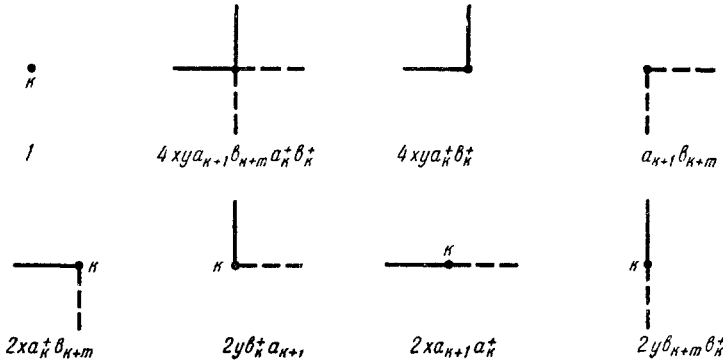


Рис. 2.

Для этой цели введем восемь элементарных графиков, изображенных на рис. 2, сопоставляемых каждому из восьми слагаемых, из которых состоят сомножители в произведении (12).

Условимся всегда линии, идущие от узла вверх и влево, обозначать сплошными и сопоставлять им операторы рождения, а линии, идущие от узла вниз и вправо, обозначать пунктирными и сопоставлять им операторы уничтожения. Далее пишем при каждом операторе рождения a_k^+ множитель $2x$ и при каждом операторе рождения b_k^+ множитель $2y$.

Поместим в каждый узел решетки по какому-либо из восьми изображенных на рис. 2 элементарных графиков.

Назовем график «дублированным», если в нем любые два соседних узла либо совсем не соединены друг с другом, либо соединены одной сплош-

ной и одной пунктирной линиями. Отметим, что совсем не могут встретиться графики, в которых некоторые из дублированных линий окажутся обе сплошными или обе пунктирными, поскольку, как видно из рис. 2, в элементарных графиках все сплошные линии направлены в противоположную к соответствующим пунктирным линиям сторону.

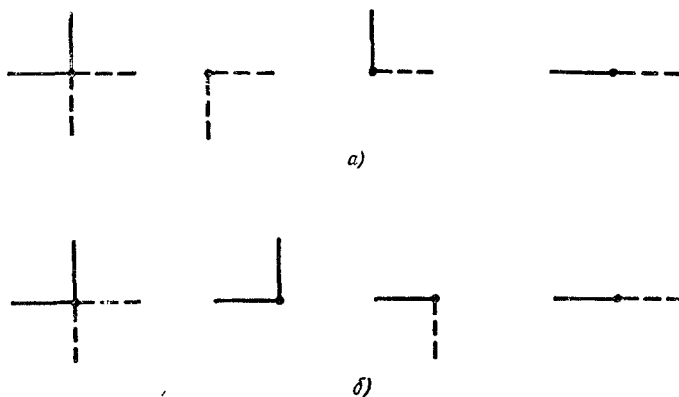


Рис. 3.

Докажем, что все дублированные графики являются замкнутыми. В самом деле, как видно из рис. 2, из каждого узла выходит четное число одинарных линий. Эти линии дублируются лишь линиями, выходящими из соседних узлов. Таким образом, в дублированных графиках через каждый узел проходит четное число дублированных линий, т. е. такой график является замкнутым.

Очевидно, каждому дублированному графику соответствует некоторая система спаренных операторов рождения и уничтожения. Например, дублированная горизонтальная линия, соединяющая $(k-1)$ -й и k -й узлы, может быть построена, если в $(k-1)$ -й узел поместить один из графиков рис. 3, а, а в k -й узел — один из графиков рис. 3, б.

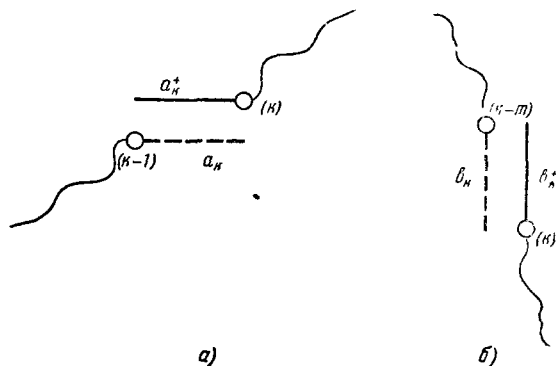


Рис. 4.

Интересующая нас часть получающегося графика изображена на рис. 4, а.

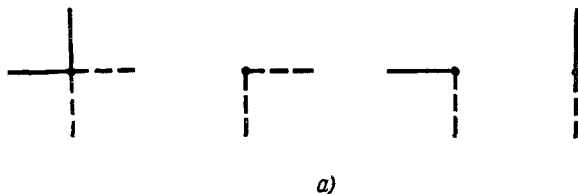
Аналогично вертикальная дублированная линия может быть построена, если в $(k-m)$ -й узел поместить один из графиков рис. 5, а, а в k -й узел — один из графиков рис. 5, б. Получающийся при этом график условно показан на рис. 4, б.

Очевидно, что построенная система «дублированных» графиков полностью эквивалентна системе графиков предыдущего параграфа и переходит в нее, если каждую дублированную линию заменить на одинарную.

Кроме рассматриваемых до сих пор дублированных графиков будут встречаться также и графики, в которых некоторые из двух соседних узлов соединены одинарной (сплошной или пунктирной) линией.

Очевидно, что подобным графикам будут соответствовать произведения Ферми-операторов, содержащие неспаренные операторы (рождения или уничтожения).

Однако при подстановке подобных произведений в формулу (13) под знак шнура они дадут нулевой вклад в сумму. Их можно поэтому



a)



б)

Рис. 5.

не рассматривать и оставлять в сумме лишь те произведения, которым соответствуют дублированные замкнутые графики.

Для $S(x, y)$ и $S^*(x, y)$ имеем выражения

$$S(x, y) = \sum_{\alpha, \beta} g_{\alpha\beta} x^\alpha y^\beta \quad (\text{формула (10)}),$$

где $g_{\alpha\beta}$ — число замкнутых графиков, составленных из α горизонтальных и β вертикальных линий, и

$$S^*(x, y) = \sum_{\alpha, \beta} (2x)^\alpha (2y)^\beta \sum \text{Sp}(a_\lambda^+ \dots a_{\lambda'} \dots b_\mu^+ \dots b_{\mu'}), \quad (14)$$

где под знаком шнура стоят спаренные произведения α Ферми-операторов a_λ^+ , a_λ и β Ферми-операторов b_μ^+ , b_μ .

Ввиду доказанной эквивалентности одинарных и дублированных графиков число членов во внутренней сумме будет в точности равно $g_{\alpha\beta}$.

Принимая во внимание, что при образовании шнура произведений Ферми-операторов

$$\text{Sp } a_\lambda^+ a_\lambda = \text{Sp } a_\lambda a_\lambda^+ = \frac{1}{2},$$

получаем по формуле (14)

$$S^*(x, y) = \sum_{\alpha, \beta} x^\alpha y^\beta (\pm 1 \pm 1 \pm 1 \pm \dots \pm 1), \quad (15)$$

где в скобках стоит $g_{\alpha\beta}$ членов, каждый из которых равен ± 1 .

Знак соответствующего члена определяется четностью перестановки, которую необходимо произвести для того, чтобы от первоначального расположения Ферми-операторов, определяемого формулой (12), перейти к «спаренному» расположению, при котором операторы рождения стоят рядом с соответствующими операторами уничтожения.

Как будет показано в приложении I, оказывается, что при спаривании операторов знак произведения всегда сохраняется и что, следовательно, в формуле (15) следует всюду брать знак плюс. Тем самым доказано, что

$$S(x, y) = S^*(x, y).$$

§ 4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИИ $S(x, y)$

Для вычисления функции $S(x, y)$ по формуле (12) мы должны вычислить шпур от произведения N сомножителей, каждый из которых есть сумма восьми членов: единицы, одного произведения четырех Ферми-операторов и шести произведений двух Ферми-операторов.

В приложении II выведена формула, позволяющая удобно вычислять шпур от произведения множителей, содержащих Ферми-операторы линейно, т. е. произведения вида

$$\prod_{i=1}^N \left[\sum_k (a_{ik}c_k^+ + b_{ik}c_k) \right]. \quad (16)$$

Мы могли бы воспользоваться этой формулой, если бы нам удалось каждый из множителей в (12) представить в виде произведения сомножителей, линейных относительно входящих в них Ферми-операторов.

Для того чтобы осуществить эту программу «линеаризации» произведения в (12), вычислим произведение

$$(A_k^{(1)} + 2xa_k^+)(A_k^{(2)} + 2yb_k^+)(A_k^{(3)} + a_{k+1})(A_k^{(4)} + b_{k+m}), \quad (17)$$

где $A_k^{(\lambda)}$ — четыре оператора, антикоммутирующих с операторами a_k^+ , a_{k+1} , b_k^+ , b_{k+m} . Мы получим тогда

$$\begin{aligned} & A_k^{(1)} A_k^{(2)} A_k^{(3)} A_k^{(4)} + 4xy a_k^+ b_k^+ a_{k+1} b_{k+m} + A_k^{(1)} A_k^{(2)} a_{k+1} b_{k+m} + \\ & + A_k^{(1)} A_k^{(3)} 2yb_{k+m} b_k^+ + A_k^{(1)} A_k^{(4)} 2yb_k^+ a_{k+1} + A_k^{(2)} A_k^{(3)} 2xa_k^+ b_{k+m} + \\ & + A_k^{(2)} A_k^{(4)} 2xa_{k+1} a_k^+ + A_k^{(3)} A_k^{(4)} 4xy a_k^+ b_k^+. \end{aligned} \quad (18)$$

Если наложить на четыре оператора $A_k^{(\lambda)}$ условия

$$\text{Sp}(A_1 A_2 A_3 A_4) = 1, \quad \text{Sp} A_k^{(\lambda)} A_k^{(\mu)} = \delta_{\lambda\mu} \quad (\lambda, \mu = 1, 2, 3, 4), \quad (19)$$

то $S(x, y)$ можно представить в виде произведения $4N$ множителей

$$S(x, y) = \text{Sp} \prod_{k=1}^N (A_k^{(1)} + 2xa_k^+) (A_k^{(2)} + 2yb_k^+) (A_k^{(3)} + a_{k+1}) (A_k^{(4)} + b_{k+m}). \quad (20)$$

Условию (19), как легко проверить, можно удовлетворить, если ввести шесть дополнительных пар Ферми-операторов $c_k^{+(\lambda)}$, $c_k^{(\lambda)}$ ($\lambda = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) и положить

$$\left. \begin{aligned} A_k^{(1)} &= \sqrt{2} (c_k^{(1)} + c_k^{(2)} + c_k^{(3)}), \\ A_k^{(2)} &= \sqrt{2} (c_k^{+(1)} + c_k^{+(4)} + c_k^{(5)}), \\ A_k^{(3)} &= \sqrt{2} (c_k^{+(2)} + c_k^{+(4)} + c_k^{(6)}), \\ A_k^{(4)} &= \sqrt{2} (c_k^{+(3)} + c_k^{+(5)} + c_k^{+(6)}). \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Формулы (20) и (21) позволяют представить шпур произведения (13) в виде шнура произведения $4N$ множителей, линейных

по операторам

$$a_k^*, a_k, b_k^*, b_k, c_k^{+(\lambda)}, c_k^{(\lambda)}.$$

По формуле (12) приложения II квадрат этого шпура может быть записан в виде детерминанта $4N$ -рядной антисимметричной матрицы D , элементы которой перенумерованы двойным индексом (k, λ) , где $k = 1, 2, \dots, N$, $\lambda = 1, 2, 3, 4$. Элементы D суть

$$\left. \begin{aligned} (k, \lambda | D | k, \lambda) &= 1, \\ (k, 3 | D | k+1, 1) &= x, \\ (k, 4 | D | k+m, 2) &= y. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Остальные матричные элементы равны нулю. Мы видим, что матрица D может быть представлена как суперматрица, состоящая из четырехрядных блоков

$$D = \begin{pmatrix} U & X & 0 & \dots & Y0 & \dots \\ -X^T & U & X & \dots & 0Y & \dots \\ 0 & -X^T & UX & \dots & 0Y & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где по формулам (22)

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & y \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Структура матрицы D показывает, что она может быть записана в виде суммы прямых произведений N -рядных матриц E и E_1, E_m на четырехрядные матрицы U, X, Y соответственно:

$$D = E \times U + E_1 \times X + E_m \times Y - E_1^T \times X^T - E_m^T \times Y^T, \quad (25)$$

где

$$(i | E | k) = \delta_{ik}, \quad (i | E_1 | k+1) = \delta_{ik}, \quad (i | E_m | k+m) = \delta_{ik}.$$

Имеем согласно (12) (приложение II)

$$S(x, y)^2 = \det | D |. \quad (26)$$

При вычислении детерминанта матрицы D мы можем подвергнуть ее преобразованию подобия, воспользовавшись формулами приложения III:

$$D' = (S \times E) D (S^{-1} \times E) = E \times U + E_1' \times X + E_m' \times Y - E_1'^T \times X^T - E_m'^T \times Y^T, \quad (27)$$

и выбрать матрицу S так, чтобы E_1' и E_m' оказались диагональными.

Считая $N = mn$ большим числом, мы можем наложить условие цикличности на элементы матрицы D

$$(N+1, \lambda | D | N+k', \lambda') = (k, \lambda | D | k', \lambda'). \quad (28)$$

Тогда

$$E_m = E_1^m, \quad E = (E_1)^N, \quad E_1^{N-1} = E_1^{-1} = E_1^T, \quad E_1^{N-m} = E_1^{-m} = E_m^T, \quad (29)$$

откуда следует, что собственными значениями матриц E_1, E_m будут корни N -й степени из единицы:

$$(p | E_1' | p) = \exp \frac{2\pi i}{N} p \equiv \alpha_p, \quad (p | E_m' | p) = \exp \frac{2\pi i}{N} mp \equiv \beta_p \quad (30)$$

Матрица D' запишется в виде блочной матрицы:

$$D' = \begin{pmatrix} U_1 & & & \\ & U_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & U_p \end{pmatrix}, \quad (31)$$

где согласно (27) и (30)

$$U_p' = U + \alpha_p X + \beta_p Y - \alpha_p X^T - \beta_p Y^T, \quad (32)$$

или по формулам (24)

$$U_p = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 + \alpha_p x & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 1 + \beta_p y \\ -1 - \alpha_p^* x & -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 - \beta_p^* y & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Вычисляя детерминант, получим:

$$\det |U_p| = (1 + x^2)(1 + y^2) - 2y(1 - x^2) \cos \frac{2\pi}{N} p - 2x(1 - y^2) \cos \frac{2\pi}{N} m p.$$

Обозначим $p = p_2 n + p_1$, $1 \leq p_1 \leq n$, $0 \leq p_2 \leq m - 1$,

$$\cos \frac{2\pi}{N} p = \cos \frac{2\pi}{m} \left(p_2 + \frac{p_1}{n} \right), \quad \cos \frac{2\pi}{N} m p = \cos \frac{2\pi}{n} p_1 \quad (34)$$

и запишем окончательное выражение для $S^2(x, y)$ в виде двойного произведения:

$$S^2(x, y) = \prod_{p_1=1}^n \prod_{p_2=0}^m \left[(1 + x^2)(1 + y^2) - 2x(1 - y^2) \cos \frac{2\pi}{n} p_1 - \right. \\ \left. - 2y(1 - x^2) \cos \frac{2\pi}{m} \left(p_2 + \frac{p_1}{n} \right) \right], \quad (35)$$

откуда, логарифмируя, получим

$$\ln S(x, y) = \frac{1}{2} \sum_{p_1=1}^n \sum_{p_2=0}^{m-1} \ln \left[(1 + x^2)(1 + y^2) - 2x(1 - y^2) \cos \frac{2\pi}{n} p_1 - \right. \\ \left. - 2y(1 - x^2) \cos \frac{2\pi}{m} \left(p_2 + \frac{p_1}{n} \right) \right]. \quad (36)$$

При больших n, m эта сумма переходит в интеграл

$$\ln S(x, y) = \frac{N}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[(1 + x^2)(1 + y^2) - 2x(1 - y^2) \cos \omega_1 - \right. \\ \left. - 2y(1 - x^2) \cos \omega_2 \right] d\omega_1 d\omega_2. \quad (37)$$

§ 5. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ, ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Имея выражение для $\ln S(x, y)$ и используя формулу (9), мы можем записать выражение для свободной энергии $F(x, y)$ в виде

$$-\frac{F(x, y)}{TN} = \frac{1}{N} \ln Z(x, y) = \ln 2 - \frac{1}{2} \ln(1 - x^2)(1 - y^2) + \\ + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[(1 + x^2)(1 + y^2) - 2x(1 - y^2) \cos \omega_1 - \right. \\ \left. - 2y(1 - x^2) \cos \omega_2 \right] d\omega_1 d\omega_2. \quad (38)$$

Подставляя $x = \text{th } \theta_1$ и $y = \text{th } \theta_2$, получим

$$-\frac{F(x, y)}{TN} = \ln 2 + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \times \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [\text{ch } 2\theta_1 \text{ch } 2\theta_2 - \text{sh } 2\theta_1 \cos \omega_1 - \text{sh } 2\theta_2 \cos \omega_2] d\omega_1 d\omega_2. \quad (39)$$

Это выражение было получено в первоначальной работе Онсагера¹.

Докажем, что выражение, входящее в (38) под знаком логарифма, неотрицательно. Имеем:

$$[(1-x^2)(1-y^2) - 4xy]^2 = (1-x^2)^2(1-y^2)^2 + 16x^2y^2 - 8xy(1-x^2)(1-y^2) \geq 0, \quad (40)$$

или

$$(1+x^4-2x^2)(1+y^4-2y^2) \geq 8xy(1-x^2)(1-y^2) - 16x^2y^2.$$

Прибавив к обоим частям неравенства положительное выражение

$$4x^2(1+y^4) + 4y^2(1+x^4) = 4x^2(1-y^2)^2 + 4y^2(1-x^2)^2 + 16x^2y^2,$$

получим

$$(1+x^4+2x^2)(1+y^4+2y^2) \geq [2x(1-y^2) + 2y(1-x^2)]^2,$$

откуда следует

$$A(x, y) = (1+x^2)(1+y^2) - 2x(1-y^2) - 2y(1-x^2) \geq 0, \quad (41)$$

причем знак равенства достигается при значениях $x = x_c$, $y = y_c$, для которых

$$(1-x_c^2)(1-y_c^2) - 4x_c y_c = 0. \quad (42)$$

Используя (41), мы можем записать свободную энергию в виде

$$-\frac{F(x, y)}{TN} = R(x, y) + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \times \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [A(x, y) + 2x(1-y^2)(1-\cos \omega_1) + 2y(1-x^2)(1-\cos \omega_2)] d\omega_1 d\omega_2 \quad (43)$$

где $R(x, y)$ — функция, регулярная при $x = x_c$, $y = y_c$.

Мы видим, что особенность свободной энергии связана с обращением в нуль выражения под логарифмом при $\omega_1 = \omega_2 = 0$ и температуре T_c , определяемой формулой

$$\text{th } \frac{I_1}{T_c} = x_c, \quad \text{th } \frac{I_2}{T_c} = y_c, \quad (44)$$

где x_c , y_c удовлетворяют соотношению (42).

Поскольку выражение

$$A(x, y) + 2x(1-y^2)(1-\cos \omega_1) + 2y(1-x^2)(1-\cos \omega_2)$$

имеет при значениях $\omega_1 = 0$, $\omega_2 = 0$, $x = x_c$, $y = y_c$ минимум и обращается в нуль, мы можем его разложить в ряд и получить

$$\frac{1}{2} \left[2 \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x \partial y} \right) \Delta x \Delta y + \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \right)_c \Delta x^2 + \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} \Delta y^2 \right] + x_c(1-y_c^2)\omega_1^2 + y_c(1-x_c^2)\omega_2^2. \quad (45)$$

Принимая во внимание, что в силу (44)

$$\Delta x = -(1 - x_c^2) \frac{y_1}{T_c^2} \Delta T, \quad \Delta y = -(1 - y_c^2) \frac{y_2}{T_c^2} \Delta T,$$

имеем для свободной энергии в окрестности особой точки:

$$-\frac{F(T)}{TN} = R(x_c, y_c) + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [C(T_c)(T - T_c)^2 + x_c(1 - y_c^2)\omega_1^2 + y_c(1 - x_c^2)\omega_2^2] d\omega_1 d\omega_2, \quad (46)$$

где

$$C(T_c) = \frac{1}{2T_c^2} \left[I_1^2 \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \right)_c (1 - x_c^2) + 2I_1 I_2 \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x \partial y} \right)_c (1 - x_c^2)(1 - y_c^2) + I_2^2 \left(\frac{\partial^2 A}{\partial y^2} \right)_c (1 - y_c^2)^2 \right]. \quad (47)$$

Интегрируя (46), получим для свободной энергии выражение

$$-\frac{F}{TN} = R_1(T_c) + C_1(T_c)(T - T_c)^2 \ln(T - T_c)^2. \quad (48)$$

Внутренняя энергия U находится из формулы

$$\frac{U}{N} = -\frac{d}{dT} \left(\frac{F}{NT} \right) = R_2(T_c) + 2C_1(T_c)(T - T_c) \ln(T - T_c)^2. \quad (49)$$

Заметим, что она остается непрерывной в точке $T = T_c$. Теплоемкость, однако, испытывает логарифмический скачок:

$$\frac{c}{N} = \frac{d}{dT} \left(\frac{U}{N} \right) = R_3(T_c) + 2C_1(T_c) \ln(T - T_c)^2. \quad (50)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что изложенная методика не может быть непосредственно обобщена на случай трехмерной решетки. Будем нумеровать соответствующие формулы для трехмерной решетки теми же цифрами, что и для двумерной, снабжая их звездочкой. Присвоим каждому узлу решетки номер

$$\left. \begin{aligned} k &= (k_3 - 1)mn + (k_2 - 1)m + k_1, \quad N = mnp, \\ 1 &\leq k_1 \leq m, \quad 1 \leq k_2 \leq n, \quad 1 \leq k_3 \leq p. \end{aligned} \right\} \quad (1^*)$$

Легко прийти к формулам

$$Z(x, y, z) = 2^N [(1 - x^2)(1 - y^2)(1 - z^2)]^{-\frac{N}{2}} S(x, y, z), \quad (9^*)$$

$$S(x, y, z) = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} g_{\alpha\beta\gamma} x^\alpha y^\beta z^\gamma. \quad (10^*)$$

Здесь $g_{\alpha\beta\gamma}$ — число замкнутых пространственных графов с α -, β -, γ -линиями в трех взаимно-перпендикулярных направлениях.

Далее аналогично (12) можно ввести Ферми-операторы, соответствующие трем взаимно-перпендикулярным направлениям в решетке a_k^+ , a_k , b_k^+ , b_k , c_k^+ , c_k . Элементарные графы, аналогичные изображенным на рис. 2, также могут быть легко построены. Нетрудно убедиться, что их будет в пространственном случае тридцать два. Для величины S^* может быть развита графическая техника, причем нетрудно получить формулу

$$S^*(x, y, z) = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} x^\alpha y^\beta z^\gamma (\pm 1 \pm 1 \pm 1 \pm \dots \pm 1), \quad (15^*)$$

где в скобках стоит $g_{\alpha\beta\gamma}$ членов. Однако, в отличие от плоского случая, здесь нельзя доказать, что все слагаемые в (15*) имеют знак плюс. Более того, имеется простой пример, показывающий, что это не так. Таким примером служит график, изображенный на рис. 6:

$$\underbrace{a_2 c_5 c_6 a_2^* a_4 c_7 c_8 a_4^* b_7 c_5^* b_8 c_6^* b_7^* c^* b_8^* c_3^*}_{\text{---}} \quad (1)$$

Проводя сравнение, как указано в (*), получаем, что график рис. 6 дает отрицательный вклад в сумму состояний. Этот факт не зависит от порядка операторов в вершинах, так как вершина каждого типа встречается в рассматриваемом графике дважды.

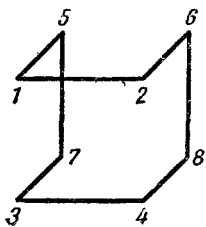


Рис. 6.

ПРИЛОЖЕНИЕ I

Докажем, что при принятом порядке операторов в (12) все графики дают неотрицательный вклад в статистическую сумму.

Для того чтобы перейти от произвольного члена суммы в (14) к графикам, необходимо переставить Ферми-операторы так, чтобы от лексикологического порядка, принятого в (12), перейти в порядку, где каждый оператор рождения стоит рядом с

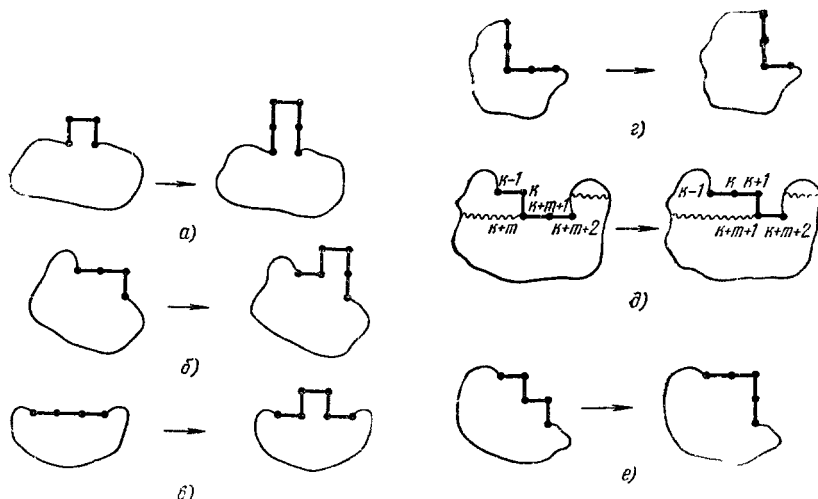


Рис. 7.

соответствующим оператором уничтожения. Заметим, что порядок, в котором расположены между собой соответствующие операторы рождения и уничтожения, несуществен ввиду имеющего место соотношения

$$\text{Sp } a_k^* a_k = \text{Sp } a_k a_k^*.$$

Доказательство достаточно провести для связанных графиков, так как несвязный график равен произведению входящих в него связанных частей.

Доказательство проведем по индукции. Для этого убедимся, что простейший график, изображенный на рис. 1, ϵ , имеет знак плюс. Этому графику соответствуют операторы

$$a_{i+m} b_{i+m} b_{i+m+1} a_{k+1}^{+} a_{i+m+1} b_{k+m}^{+} a_{k+m+1}^{+} b_{k+m+1}^{+}.$$

Совершая перестановки обычным образом, убеждаемся, что график имеет знак плюс.

Рассмотрим сначала произвольный связный график без самопересечения. Очевидно, что любой такой график может быть построен из элементарного путем последовательного применения одной из операций, изображенных на рис. 7.

Нам достаточно показать, что всякая такая операция не меняет знака графика. Поскольку элементарный график дает в (15) положительный вклад, мы покажем тем самым, что положительный вклад дают все графики, не содержащие самопересечений. Доказательство проводится для всех операций на рис. 7 аналогично; поэтому здесь мы рассмотрим какой-либо один пример, скажем, рис. 7, δ .

Выпишем операторы, соответствующие левому графику рис. 7, δ :

$$\alpha a_k^{+} b_{i+m} \beta b_{k+m}^{+} a_{i+m+1} a_{k+m+2}^{+} a_{k+m+1}^{+} \gamma. \quad (1)$$

Здесь α означает совокупность Ферми-операторов, относящихся к узлам, предшествующим k -му, β — к узлам, заключенным между k -м и $(k+m)$ -м узлами (на рис. 7, δ соответствующее место графика показано волнистой линией), γ — к узлам, следующим за $(k+m+1)$ -м узлом.

После пристройки элементарного квадрата левый график рис. 7, δ переходит в правый. Выпишем соответствующие ему операторы:

$$\alpha a_{k+1}^{+} a_k^{+} a_{k+1}^{+} b_{k+m+1}^{+} \beta b_{k+m+1}^{+} a_{k+m+2}^{+} \gamma. \quad (2)$$

Спаривая в (2) операторы b_{k+m}^{+} , b_{k+m+1}^{+} , а также a_{i+m+1} , a_{k+m+1}^{+} , получим

$$\text{sgn}(1) = -\text{sgn} \alpha a_k^{+} \beta a_{k+m+1}^{+} \gamma.$$

Таким же способом убеждаемся, что

$$\text{sgn}(2) = -\text{sgn} \alpha a_k^{+} \beta a_{k+m+1}^{+} \gamma.$$

Таким образом, имеем

$$\text{sgn}(1) = \text{sgn}(2),$$

и графики, изображенные на рис. 7, δ , имеют одинаковый знак.

Таким же образом проводится доказательство во всех прочих случаях.

Для того чтобы провести доказательство для графиков с самопересечением, необходимо в число операций пристройки включить операции типа изображенной на рис. 8.

Доказательство при этом проводится в точности аналогично предыдущему случаю.

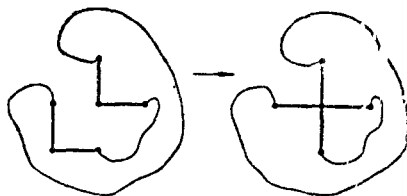


Рис. 8.

Выражение вида (8) называется пфаффианом ⁵ треугольной таблицы величин:

$$S_{2\tau} = \begin{pmatrix} \text{Sp}(L_1 L_2) & \text{Sp}(L_1 L_3) & \dots & \text{Sp}(L_1 L_{2\tau}) \\ & \text{Sp}(L_2 L_3) & \dots & \text{Sp}(L_2 L_{2\tau}) \\ & \dots & \dots & \dots \\ & & & \text{Sp}(L_{2\tau-1} L_{2\tau}) \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Минором пфаффиана, соответствующим элементу $\text{Sp}(L_i L_j)$, $j > i$, называется пфаффиан, получающийся из пфаффиана (7) вычеркиванием двух строк (i -й и k -й) и двух столбцов (i -го и k -го).

Формула (7) есть разложение пфаффиана (11) по элементам первой строки.

Фундаментальная теорема в теории пфаффианов, которую мы приводим без доказательства, устанавливает связь между квадратом пфаффиана и детерминантом соответствующей антисимметричной матрицы:

$$S_{2\tau}^2 = \begin{pmatrix} 0 & \text{Sp}(L_1 L_2) & \text{Sp}(L_1 L_3) & \dots & \text{Sp}(L_1 L_{2\tau}) \\ -\text{Sp}(L_1 L_2) & 0 & \text{Sp}(L_2 L_3) & \dots & \text{Sp}(L_2 L_{2\tau}) \\ -\text{Sp}(L_1 L_3) & -\text{Sp}(L_2 L_3) & 0 & \dots & \text{Sp}(L_3 L_{2\tau}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\text{Sp}(L_1 L_{2\tau}) & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Таким образом, вычисление плура по формуле (4) сводится по формулам (5) и (12) к вычислению детерминанта.

ПРИЛОЖЕНИЕ III

Прямым произведением n -рядной матрицы A на m -рядную матрицу B называется nm -рядная блочная матрица

$$A \times B = \begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1m}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \dots & A_{2m}B \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1}B & A_{n2}B & \dots & A_{nm}B \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Очевидно, что $A \times B \neq B \times A$.

Из определения следуют формулы для произведений:

$$\begin{aligned} (A \times B)(C \times D) &= AC \times BD, \\ (A \times B)(C \times D)(F \times G) &= ACF \times BDG. \end{aligned} \quad (14)$$

Прямое произведение можно подвергнуть преобразованию подобия

$$(S_1 \times S_2)(A \times B)(S_1^{-1} \times S_2^{-1}) = S_1 A S_1^{-1} \times S_2 B S_2^{-1}. \quad (15)$$

В частном случае $S_1 = E$ мы получаем формулу

$$(E \times S_2)(A \times B)(E \times S_2^{-1}) = A \times S_2 B S_2^{-1}, \quad (16)$$

приводимую в тексте.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944).
2. B. Kaufman, Phys. Rev. 76, 1232 (1949).
3. Ю. Б. Румер, УФН 53, 245 (1954).
4. C. A. Hurst, H. S. Green, J. Chem. Phys. 33, 1059 (1961).
5. E. R. Caianiello, Suppl. del Nuovo cimento 14, 177 (1959).

