1 Вводная лекция

2 Элементы статистической термодинамики

3 Модели статистической механики на решетке

3.1 Одномерная модель Изинга

Рассмотрим систему N магнитных моментов σ_i (спинов), каждый из которых может принимать два значения: $\sigma_i = \pm 1$. Энергия конфигурации $\{\sigma_i\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ равна

$$E(\{\sigma_i\}) = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$$

(здесь J – константа взаимодействия двух соседних моментов, H – внешнее магнитное поле, и наложено периодическое граничное условие $\sigma_{N+1} = \sigma_1$). Эта модель называется одномерной моделью Изинга.

Статсумма при температуре T:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-E(\{\sigma_i\})/T} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\Big(K \sum_{j=1}^{N} \sigma_j \sigma_{j+1} + B \sum_{j=1}^{N} \sigma_j\Big)$$

где $K = J/T$, $B = H/T$. Запишем ее в виде

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{j=1}^{N} e^{K\sigma_j\sigma_{j+1} + \frac{1}{2}(\sigma_j + \sigma_{j+1})} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}$$

где матрица T (трансфер-матрица или матрица перехода) определена следующим образом:

$$T_{\sigma\sigma'} = e^{K\sigma\sigma' + \frac{B}{2}(\sigma+\sigma')}, \quad T = \begin{pmatrix} e^{K+B} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-B} \end{pmatrix}$$

($T_{++} = e^{K+B}$, $T_{+-} = e^{-K}$ и т.д.). Для удобства мы выбрали матрицу T симметричной, но это не обязательно – скажем, выбор $T_{\sigma\sigma'} = e^{K\sigma\sigma' + B\sigma}$ приводит к тем же результатам. Очевидно, в выражении для статсуммы стоит след N-й степени матрицы T:

$$Z_N = \operatorname{tr} T^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N$$

где

$$\lambda_\pm = e^K \sinh B \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2 B + e^{-2K}}$$

собственные значения матрицы T. Поскольку $\lambda_+ > \lambda_-$, в пределе больших N находим для свободной энергии

$$F = -TN \log \lambda_+ = -TN \log\Big(e^{J/T} \sinh(H/T) + \sqrt{e^{2J/T} \sinh^2(H/T) + e^{-2J/T}}\Big)$$

Дифференцируя это выражение по параметрам T, H, можно найти термодинамические величины – энергию, намагниченность, а также теплоемкость и магнитную восприимчивость, выражающиеся через вторые производные. Отметим, что свободная энергия не имеет особенностей как функция T при $T > 0$ – это означает, что в системе отсутствуют фазовые переходы.

3.2 Модель среднего поля

Рассмотрим простую модель, которая не вполне физична, т.к. содержит нелокальные взаимодействия, но позволяет описать фазовый переход.

Пусть опять имеются спины $\sigma_i = \pm 1$ (теперь не обязательно выстроенные в цепочку), а энергия равна

$$E(\{\sigma_i\}) = -\frac{J}{N}\sum_{i<j}\sigma_i\sigma_j - H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$$

Такой ее вид означает, что каждый спин одинаковым образом взаимодействует со всеми остальными. Эта модель называется моделью среднего поля.

Введем полную намагниченность

$$M = \sum_{i=1}^{N}\sigma_i$$

Поскольку $M^2 = N + 2\sum_{i<j}\sigma_i\sigma_j$,

$$E = -\frac{JM^2}{2N} - HM + \frac{J}{2}$$

Если n спинов направлены вниз (равны -1), а $N-n$ вверх, то $M = N-2n$, и поскольку имеются C_N^n таких конфигураций, статсумма равна

$$Z = \sum_{n=0}^{N} c_n$$

где

$$c_n = \frac{N!}{n!(N-n)!}\,\exp\left[\frac{2J}{NT}\,n^2 - 2\Big(\frac{J}{T}+\frac{H}{T}\Big)n + \frac{H}{T}N + \frac{J}{2T}(N-1)\right]$$

Определяющий вклад в сумму при больших N вносит максимальное слагаемое. Чтобы его найти, применим формулу Стирлинга

$$\log c_n = N\log N - N - n\log n - (N-n)\log(N-n) + \frac{2J}{NT}\,n^2 - 2\Big(\frac{J}{T}+\frac{H}{T}\Big)n + \frac{H}{T}N + \frac{J}{2T}(N-1)$$

и продифференцируем по n. Для $y = N/n$ получим уравнение

$$T\log(y-1) + 4Jy^{-1} - 2(J+H) = 0$$

Анализ показывает, что при $T > J$ имеется один корень, соответствующий максимуму, а при $T < J$ и достаточно малом H – три (два максимума, один минимум).

При $T > J$, беря значение в максимуме, получаем уравнение

$$m = \tanh \frac{Jm + H}{T} \tag{1}$$

для средней намагниченности на один узел

$$m = \frac{M}{N} = 1 - \frac{2n}{N} = 1 - 2y^{-1}$$

Свободная энергия на один узел:

$$f/T = -\lim_{N\to\infty} N^{-1} \log Z$$

Заменив $\log Z$ логарифмом максимального члена c_n в сумме, найдем

$$f/T = \frac{1}{2} \log \frac{1 - m^2}{4} + \frac{Jm^2}{2T}$$

Из (1) можно выразить

$$H = -Jm + T\mathrm{arctanh}\, m$$

При $T > J$ (высокие температуры) зависимость $M(H)$ однозначна – при изменении поля от $-\infty$ до $+\infty$ намагниченность монотонно возрастает от -1 до $+1$. Однако, при $T < J$ и достаточно малых H эта зависимость теряет однозначность – одному значению H отвечают три различных значения m. Этот не имеющий физического смысла результат получился из-за того, что уравнение (1) было экстраполировано в область $T < J$ (низкие температуры), где требуется более аккуратный анализ, заключающийся в нахождении абсолютного максимума коэффициентов c_n. Правильная кривая зависимости $M(H)$ при $T < J$ терпит разрыв при $H = 0$, что означает существование спонтанной намагниченности, величина которой находится как положительный корень уравнения

$$m_0 = \tanh \frac{Jm_0}{T}$$

Таким образом, модель среднего поля имеет фазовый переход при температурах ниже критической $T_c = J$. При малых $t = (T_c - T)/T_c$, разлагая tanh, находим

$$m_0 = (3t)^{1/2}(1 + O(t))$$

При $H \to 0$ для свободной энергии имеем $f/T = -\log 2$ при $T > T_c$ и $f/T = -\log 2 - 3t^2/4 + O(t^3)$ при $T < T_c$. Отсюда видно, что свободная энергия непрерывна в критической точке, а теплоемкость (вторая производная по t) испытывает скачок.

3.3 Двумерная модель Изинга

Рассмотрим N спинов $\sigma_i = \pm 1$ на квадратной решетке. Пусть взаимодействуют только ближайшие соседи, а внешнего поля нет, тогда энергия конфигурации спинов:

$$E(\{\sigma\}) = -\sum_{(ij)} J^x_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{(ik)} J^y_{ik}\sigma_i\sigma_k$$

Первая сумма берется по всем горизонтальным связям (ij), а вторая – по всем вертикальным связям (i,k). В общем случае взаимодействие может зависеть от положения узла. Это неоднородная двумерная модель Изинга без внешнего поля. Статсумма:

$$Z=\sum_{\{\sigma\}} e^{-E(\{\sigma\})/T}$$

Замена переменной суммирования $\sigma_i \to -\sigma_i$ на i-м узле показывает, что статсумма не меняется, если изменить знаки всех J^x_{ij}, J^y_{ik}, соответствующих четырем ребрам, входящим в узел i. Аналогично, статсумма не изменится, если изменить знаки взаимодействия на ребрах, которые пересекают любой замкнутый контур, окружающий некоторую область на плоскости.

3.3.1 Высокотемпературное и низкотемпературное разложения

Рассмотрим двумерную модель Изинга на прямоугольной решетке $\mathcal{L}$ размера $N_x \times N_y$ (тогда $N = N_x N_y$) с периодическими (тороидальными) граничными условиями в обоих направлениях. Пусть модель однородна (т.е. взаимодействие между ближайшими соседями по вертикали и по горизонтали не зависит от их положения), но анизотропна, т.е. вертикальное и горизонтальное взаимодействие могут быть разными. Энергия примет вид:

$$E(\{\sigma\}) = -J^x \sum_{(ij)} \sigma_i\sigma_j - J^y \sum_{(ik)} \sigma_i\sigma_k$$

Статсумма:

$$Z=\sum_{\{\sigma\}} \exp\Big(K\sum_{(ij)}\sigma_i\sigma_j + L\sum_{(ik)}\sigma_i\sigma_k\Big)$$

где мы обозначили $K = J^x/T$, $L = J^y/T$. Изменением знаков переменных суммирования σ через одну в шахматном порядке, (что возможно на всей решетке, если N_x и N_y четные) можно поменять знаки у K и L, так что статсумма не изменится. Аналогично, если менять знаки переменных суммирования только в вертикальных или горизонтальных рядах (через один), можно изменить знаки у K и L по отдельности. Поэтому мы будем считать, что $K, L > 0$ (ферромагнитный случай).

Так как произведение $\sigma_i\sigma_j$ может иметь всего два значения ±1,

$$e^{K\sigma_i\sigma_j} = \cosh K + \sinh K\sigma_i\sigma_j$$

Используя это, представим статсумму в виде

$$Z = (\cosh K\,\cosh L)^N \sum_{\{\sigma\}}\prod_{(ij)}(1+v\sigma_i\sigma_j)\prod_{(ik)}(1+w\sigma_i\sigma_k)$$

где первое произведение берется по всем N горизонтальным связям (ij), а второе – по всем N вертикальным связям (i,k), и

$$v=\tanh K, \qquad w=\tanh L$$

После раскрытия скобок получится сумма 2^{2N} членов. Каждый член может быть представлен графически: проведем линию вдоль ребра (ij), если из соответствующего сомножителя выбирается слагаемое $v\sigma_i\sigma_j$ или $w\sigma_i\sigma_j$, и не будем этого делать, если выбирается слагаемое 1. Общий вид члена этой суммы таков: $v^n w^m \sigma_1^{n_1} \sigma_2^{n_2} \sigma_3^{n_3} \ldots$, где n (m) – число горизонтальных (вертикальных) связей на графике, а n_i – число линий, входящих в i-й узел (очевидно, $n_i = 0, 1, 2, 3, 4$). После суммирования по всем конфигурациям $\{\sigma\}$ ненулевой вклад дадут только члены, у которых все n_i четны, и в этом случае вклад от такого члена будет $2^N v^n w^m$. Таким образом,

$$Z_N = 2^N (\cosh K \, \cosh L)^N \sum_{\ell} (\tanh K)^n (\tanh L)^m \tag{2}$$

где сумма идет по всем возможным комбинациям линий ℓ на решетке $\mathcal{L}$ с четным числом линий, сходящихся в каждом узле. Выражение для статсуммы (2), будучи точным, может быть практически полезно при высоких температурах, когда K и L малы, и в сумме доминируют члены с малыми n и m. Поэтому оно называется *высокотемпературным разложением.*

Вместе с решеткой $\mathcal{L}$ рассмотрим *дуальную решетку* $\mathcal{L}^*$, узлами которой являются центры плакетов исходной решетки. Каждой паре соседних узлов решетки $\mathcal{L}$ одно-однозначно соответствует ребро решетки $\mathcal{L}^*$. Для заданной спиновой конфигурации на решетке $\mathcal{L}$ проведем линию по тем ребрам решетки $\mathcal{L}^*$, которые отвечают парам соседних узлов решетки $\mathcal{L}$ с *различными* спинами. Тогда в каждом узле сходится, очевидно, четное число линий (0, 2 или 4). Поэтому все линии замыкаются, образуя контура (вообще говоря, несвязные и пересекающиеся). Эти контура делят плоскость на домены со спинами вверх и со спинами вниз. Для каждой такой конфигурации контуров на $\mathcal{L}^*$ имеются ровно две соответствующие ей конфигурации спинов на $\mathcal{L}$, отличающиеся переворотом всех спинов.

Пусть в некоторой конфигурации спинов имеются n горизонтальных пар соседних узлов с противоположно направленными спинами и m таких вертикальных пар. Тогда вклад в статсумму от этой конфигурации будет

$$\exp\Big(K(N-2n) + L(N-2m)\Big)$$

(здесь использован тот очевидный факт, что полное число горизонтальных связей равно полному числу вертикальных и равно N). Поэтому

$$Z_N = 2e^{(K+L)N} \sum_{\ell^*} e^{-2Kn-2Lm} \tag{3}$$

где сумма идет по всем возможным комбинациям линий на решетке $\mathcal{L}^*$ с четным числом линий, сходящихся в каждом узле. Множитель 2 возник из-за того, что, как уже отмечалось, каждой конфигурации таких линий отвечают две конфигурации спинов на $\mathcal{L}$. Выражение для статсуммы (3), будучи точным, может быть практически полезно при низких температурах, когда K и L велики, и в сумме доминируют члены с малыми n и m. Поэтому оно называется *низкотемпературным разложением.*

Отметим важное для дальнейшего обстоятельство. При переходе к дуальной решетке n в формуле (3) означает число *вертикальных* ребер, входящих в контур на дуальной решетке, а m – число *горизонтальных.* Так произошло потому, что горизонтальному ребру исходной решетки с противоположно направленными спинами соответствует вертикальное ребро дуальной решетки, а вертикальному ребру исходной решетки – горизонтальное на дуальной. Поэтому, сравнивая (2) и (3), мы видим, что правильнее будет переписать (3) в виде

$$Z_N = 2e^{(K+L)N} \sum_{\ell^*} (e^{-2L})^n (e^{-2K})^m \tag{4}$$

так что теперь в обеих формулах n означает число горизонтальных ребер контура, а m – число вертикальных.

3.3.2 Дуальность Крамерса-Ванньe. Критическая точка

Обратим внимание на то, что высоко- и низкотемпературные разложения получились формально очень похожими - они отличаются только общими множителями и константами взаимодействия (если одна велика, то другая мала, и наоборот). Этот факт можно использовать для нахождения критической точки, что было сделано впервые Крамерсом и Ванньe еще до появления точного решения.

Введем функцию

$$\Phi(x, y) = \lim_{N\to\infty} N^{-1} \log \sum_{\ell} x^n y^m$$

где сумма идет по всем конфигурациям контуров на решетке с четным числом линий, сходящихся в каждом узле, а n, m – число соответственно горизонтальных и вертикальных ребер, входящих в контур.

Пусть $f = -T \lim_{N\to\infty}(N^{-1} \log Z_N)$ – свободная энергия на один узел в термодинамическом пределе. Обозначим для краткости $\psi = -f/T$. Эта величина может зависеть только от K, L: $\psi = \psi(K, L)$. Высокотемпературное разложение дает

$$\psi(K, L) = \log(2 \cosh K \cosh L) + \Phi(\tanh K, \tanh L)$$

а низкотемпературное (в форме (4))

$$\psi(K, L) = K + L + \Phi(e^{-2L}, e^{-2K})$$

Введем "двойственные" параметры формулами

$$\tanh K^* = e^{-2L}, \qquad \tanh L^* = e^{-2K}$$

что можно переписать в более симметричной форме

$$\sinh 2K^* \sinh 2L = 1\,, \qquad \sinh 2L^* \sinh 2K = 1$$

Выразим $\psi(K^*, L^*)$, пользуясь высокотемпературным разложением:

$$\psi(K^*, L^*) = \log(2 \cosh K^* \cosh L^*) + \Phi(e^{-2L}, e^{-2K})$$

Вычитая отсюда низкотемпературное разложение для $\psi(K, L)$, видим, что функция Φ сокращается, и остается

$$\psi(K^*, L^*) = K + L + \psi(K, L) - \log(2 \cosh K^* \cosh L^*)$$

или

$$\psi(K^*, L^*) = \psi(K, L) + \frac{1}{2} \log(\sinh 2K \, \sinh 2L) \tag{5}$$

(соотношение взаимности). Если K, L велики, то K^*, L^* малы, и наоборот. Таким образом, соотношение (5) связывает свободные энергии при высокой и при низкой температурах.

Рассмотрим изотропную модель с $L = K$. Соотношение взаимности (5) примет вид

$$\psi(K^*) = \psi(K) + \log\sinh 2K$$

Критическая точка (если она существует) – это такая точка $K = K_c$, в которой свободная энергия имеет особенность (неаналитичность). Но тогда соотношение взаимности говорит, что K_c^* тоже должна быть критической точкой (поскольку $\log\sinh 2K$ не имеет особенностей при $K > 0$). Если предположить, что критическая точка одна, то она должна переходить в себя, т.е. $K_c^* = K_c$. Отсюда

$$\sinh 2K_c = 1$$

или

$$e^{2K_c} = 1 + \sqrt{2}$$

В случае анизотропной модели аналогичные рассуждения показывают, что если в модели имеется ровно одна критическая кривая, то она дается соотношением

$$\sinh 2K\ \sinh 2L = 1$$

Точное решение подтверждает существование критической кривой, предсказанной с помощью соображений дуальности.

3.3.3 Точное выражение для свободной энергии

Здесь мы приведем точный результат, впервые полученный Онзагером. Свободная энергия $f = F/(N_x N_y)$ на один узел при $N_x \to \infty$, $N_y \to \infty$:

$$-f/T = \log 2 + \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \log\Big(\cosh 2K\ \cosh 2L - \sinh 2K\ \cos\theta_1 - \sinh 2L\ \cos\theta_2\Big)$$

В книге Бакстера [1] этот результат дан в иной форме. Свободная энергия на один узел при больших N_x, N_y:

$$-f/T = \frac{1}{2N_x}\sum_{j=1}^{N_x} \log\left(2\cosh 2K\ \cosh 2L + 2\sqrt{k^2 + 1 - 2k\cos\frac{\pi(2j-1)}{N_x}}\ \right)$$

где

$$k = \sinh 2K\ \sinh 2L$$

В пределе $N_x \to \infty$ сумму можно заменить на интеграл:

$$-f/T = \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} \log\left(2\cosh 2K\ \cosh 2L + 2\sqrt{k^2 + 1 - 2k\cos 2\theta}\ \right) d\theta$$

Список литературы

[1] Р.Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, М., Мир, 1985.

[2] А.Белавин, А.Кулаков, Р.Усманов, *Лекции по теоретической физике*, МЦНМО, М., 2001.

[3] К.Хуанг, *Статистическая механика*, М., 1966.

[4] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Курс теоретической физики, т. 5 *Статистическая физика.*