Забуранний Олесь Володимирович

Метод трансфер-матриці у наближенні сильної анізотропої і сильної взаємодії для двовимірних класичних систем

Роботу отримано 19 січня 2010 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

Національна академія наук України

ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ICMP–10–01U

О.В. Забуранний

ПОБУДОВА ТРАНСФЕР-МАТРИЦЬ ДЛЯ КЛАСИЧНИХ ДВОВИМІРНИХ СИСТЕМ У ГРАНИЦІ СИЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

ЛЬВІВ

УДК: 538.9

PACS: 05.10.-a

Побудова трансфер-матриць для класичних двовимірних систем у границі сильної взаємодії

О.В. Забуранний

Анотація. Наближення сильної анізотропії дозволяє встановити відповідність між термодинамікою двовимірних класичних систем і енергією основного стану відповідних одновимірних квантових систем. Запропоновано наближення сильної взаємодії, яке є узагальненням наближення сильної анізотропії. Знайдено умови, яким повинні задовільняти діагональна і позадіагональна частина трансфер-матриці, при яких Гамільтоніан квантової системи можна обчислити явно. Наближення порівняні на прикладі двовимірної спін-$\frac{1}{2}$ моделі Ізинга.

Transfer matrix for classical two-dimensional systems in the strong interaction limit

O.V. Zaburannyi

Abstract. Strong anisotropy limit allows to establish correspondence between the thermodynamics of two-dimensional classical systems and ground-state energy of correspondent one-dimensional system. Strong interaction limit, being the generalization of strong anisotropy limit, was proposed. Conditions for diagonal and off-diagonal transfer matrix parts which allow found quantum Hamiltonian explicitly was found. Two approximations were compared for two-dimensional spin-$\frac{1}{2}$ Ising model.

Подається в Journal of Statystical Physics
Submitted to Journal of Statystical Physics

Серед методів статистичної фізики метод трансфер-матриці виділяється своєю універсальністю. Застосування цього методу до найрізноманітніших класичних моделей дозволило встановити еквівалентність багатьох з них, принаймні що стосується термодинамічних властивостей [1, 2]. Іншою важливою особливістю є встановлення взаємозв'язку між класичними моделями і квантовими моделями в просторі з розмірністю зменшеною на одиницю [3], для чого необхідно прийняти крайню анізотропію класичної системи. Метою даної роботи було з'ясувати, при яких умовах накладених на класичну систему наближення сильної анізотропії є застосовне. Крім того, введене нове наближення, яке справедливе при послабленій вимозі сильної взаємодії в одному з вимірів. Нове наближення може бути використане лише при певних умовах, що накладаються на комутатор діагональної і позадіагональної компоненти трансфер-матриці і вироджується у сильну анізотропію при постулюванні комутативності згаданих компонент. Для спін-$\frac{1}{2}$ двовимірної моделі Ізинга знайдені квантові Гамільтоніани у одному вимірі. У границі сильного зв'язку порівняно з сильною анізотропією присутні триспінові взаємодії і зміна поперечного поля.

1. Метод трансфер-матриці

В цьому розділі буде коротко викладений метод побудови трансфер-матриці для двовимірних класичних моделей у зручній для подальшого викладу формі. Розглядатиметься двовимірна модель з дискретними станами, енергію якої можна в найзагальнішому випадку записати у формі суми за парами рядків

$$E = \sum_{m=1}^{M} E(\xi_m, \xi_{m+1}) \tag{1.1}$$

де ξ_m деяка змінна чи змінні, від яких залежить енергія рядку m. Природа і залежність енергії від змінних ξ_m є неважливою для побудови трансфер-матриці і повинні бути описані для кожної системи що розглядається. На цьому етапі ми лише вимагатимемо просторової симетрії моделі $E(\xi_m, \xi_{m+1}) = E(\xi_{m+1}, \xi_m)$ і позначимо *кількість* можливих значень ξ_m через $\mathbb{L}$. Для того, щоб обчислити термодинамічні властивості системи потрібно знайти вільну енергію на один рядок

$$f=-\frac{1}{\beta M}\ln Z=-\frac{1}{\beta}\ln\sum_{\xi_1=1}^{\mathbb{L}}\sum_{\xi_2=1}^{\mathbb{L}}\dots\sum_{\xi_M=1}^{\mathbb{L}}\mathrm{e}^{-\beta\sum_{m=1}^{M}E(\xi_m,\xi_{m+1})}$$
$$=-\frac{1}{\beta M}\ln\sum_{\xi_1=1}^{\mathbb{L}}\sum_{\xi_2=1}^{\mathbb{L}}\dots\sum_{\xi_M=1}^{\mathbb{L}}\prod_{m=1}^{M}\mathrm{e}^{-\beta E(\xi_m,\xi_{m+1})}\quad(1.2)$$

де ми прийняли періодичні граничні умови $\xi_{M+1}=\xi_1$ і температурну шкалу $k=1$. В (1.2) кожна змінна ξ_m з'являється лише в двох послідовних множниках і сумування може бути перерозподілене

$$f=-\frac{1}{\beta M}\ln\sum_{\xi_1=1}^{\mathbb{L}}\sum_{\xi_2=1}^{\mathbb{L}}\mathrm{e}^{-\beta E(\xi_1,\xi_2)}\sum_{\xi_3=1}^{\mathbb{L}}\mathrm{e}^{-\beta E(\xi_2,\xi_3)}$$
$$\times\sum_{\xi_4=1}^{\mathbb{L}}\mathrm{e}^{-\beta E(\xi_3,\xi_4)}\dots\sum_{\xi_M=1}^{\mathbb{L}}\mathrm{e}^{-\beta E(\xi_{M-1},\xi_M)}\mathrm{e}^{-\beta E(\xi_M,\xi_1)}\quad(1.3)$$

Кожна змінна ξ_m може приймати $\mathbb{L}$ різних значень, які ми можемо перелічити, або для зручності прийняти $\xi_m=\overline{1,\mathbb{L}}$. Введемо величину $T_{\xi_m,\xi_{m+1}}=\mathrm{e}^{-\beta E(\xi_m,\xi_{m+1})}$ яку ми можемо вважати матричним елементом матриці розміром $\mathbb{L}\times\mathbb{L}$ T - трансфер-матриці. Кожна сума в (1.3) $\sum_{\xi_m=1}^{\mathbb{L}}$ для $m=\overline{2,M}$ відповідає добуткові матриць. Завдяки тому, що матриці не залежать від номера рядка m (матричні елементи залежать тільки від значень ξ на двох послідовних рядках) добуток $M-1$ матриці є степінню матриці. Остання сума (1.3) $\sum_{\xi_1=1}^{\mathbb{L}}$ є слідом від T^{M-1}.

$$f=-\frac{1}{\beta M}\ln\mathrm{Tr}\,T^{M-1}=-\frac{1}{\beta M}\ln\sum_{l=1}^{\mathbb{L}}\lambda_l^{M-1}\quad(1.4)$$

де λ_l власне значення T, яку називають трансфер-матрицею. Для додатньо-визначеної матриці T теорема Перрона-Фробеніуса [4] стверджує існування максимального позитивного власного значення $\lambda_{max}>|\lambda_{l\neq max}|$. Матриця T симетрична і дійсна, отже ермітова - тому всі її власні значення є дійсними. В термодинамічній границі $M\to\infty$ всіма, крім максимального власного значення можна нехтувати і вираз для вільної енергії набуває форми

$$f=-\frac{1}{\beta}\ln s\lambda_{max}\quad(1.5)$$

де s - кратність максимального власного значення.

Тепер загальна відповідність між класичною двовимірною моделлю (1.1) і квантовою одновимірною моделлю може бути встановлена. Зауважимо ще раз, що матричні елементи $T_{\xi_m,\xi_{m+1}}$ не залежать від номера рядка m і можуть для зручності позначатися як $T_{\xi,\xi'}$.

Розглянемо $\mathbb{L}$-розмірний гільбертовий простір і співставимо кожне можливе значення змінної ξ (конфігурацію рядка) з вектором ортонормованого базису $\{|\xi\rangle\}_{\xi=\overline{1,\mathbb{L}}}$. Введемо оператор що діє у згаданому просторі

$$\hat{T}=\sum_{\xi,\xi'=1}^{\mathbb{L}}|\xi\rangle T_{\xi,\xi'}\langle\xi'|\quad(1.6)$$

і покажемо, що енергія квантової системи, що описується Гамільтоніаном

$$\hat{H}=-\frac{1}{\beta}\ln\hat{T}\quad(1.7)$$

є рівною вільній енергії (1.5)

$$e_0=\lim_{\beta_q\to\infty}\frac{\mathrm{Tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta_q\hat{H}}\hat{H}\right)}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta_q\hat{H}}}=-\frac{1}{\beta}\lim_{\beta_q\to\infty}\frac{\mathrm{Tr}\left(\hat{T}^{\frac{\beta_q}{\beta}}\ln\hat{T}\right)}{\mathrm{Tr}\,\hat{T}^{\frac{\beta_q}{\beta}}}=-\frac{1}{\beta}\ln s\lambda_{max}=f.\quad(1.8)$$

Де β_q є оберненою температурою квантової системи (1.7) і не повинна плутатись з оберненою температурою класичної системи (1.1) β.

2. Наближення для трансфер-матриці

В загальному неможливо знайти логарифм трансфер-матриці і явно записати Гамільтоніан (1.7). В цій частині ми розглянемо два наближенні методи знаходження Гамільтоніану квантової системи. Обидва наближення виходять з поділу енергії (1.1) на дві частини

$$E(\xi,\xi')=\frac{E^x(\xi)}{2}+E^y(\xi,\xi')+\frac{E^x(\xi')}{2}.\quad(2.1)$$

$\frac{E^x(\xi)}{2}$ є половиною енергії рядка, що задається змінною ξ і $E^y(\xi,\xi')$ є енергією взаємодії між двома сусідніми рядками заданими через ξ та ξ'. Поділ (2.1) дозволяє нам записати $T_{\xi,\xi'}=T_\xi^x T_{\xi,\xi'}^y T_{\xi'}^x$ де

$T^x_\xi = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2\beta}E^x(\xi)}$ і $T^y_{\xi,\xi'} = \mathrm{e}^{-\beta E^y(\xi,\xi')}$ і відповідно переписати T через матричний добуток $T = T^x T^y T^x$ і $\hat{T}$ як добуток операторів

$$\hat{T} = \sum_{\xi,\xi'=1}^{\mathbb{L}} |\xi\rangle T_{\xi,\xi'}\langle\xi'| = \hat{T}^x\hat{T}^y\hat{T}^x. \tag{2.2}$$

де $\hat{T}^x = \sum_{\xi=1}^{\mathbb{L}} |\xi\rangle T^x_\xi\langle\xi|$ є діагональним оператором, що відповідає діагональному співмножнику трансфер-матриці і $\hat{T}^y = \sum_{\xi,\xi'=1}^{\mathbb{L}} |\xi\rangle T^y_{\xi,\xi'}\langle\xi'|$ - позадіагональною частиною.

Для подальшого прогресу ми перепишемо $\hat{T}^y$ в дещо іншій формі. Поділ енергії на дві частини (2.1) не є єдино можливим. Ми вимагатимемо $E^y(\xi,\xi) = 0$ що може *завжди* бути досягнено переозначенням ненульової $E^y(\xi,\xi)$ як частини $E^x(\xi)$. З останньої умови маємо, що діагональні елементи T^y рівні одиниці $T^y_{\xi,\xi} = 1$. З-поміж усіх позадіагональних елементів $\hat{T}^y$ ми виділимо всі пропорційні до деякого параметру t_y який потім вважатимемо малим. Позначимо як $\hat{Y}$ оператор для якого усі, крім згаданих матричних елементів рівні нулю. Також перепишемо діагональну частину $\hat{T}^x$ у формі $\hat{T}^x = \mathrm{e}^{t_x\hat{X}}$, де $\hat{X}$ - діагональний оператор. Підсумовуючи, отримаємо

$$\hat{T} = \mathrm{e}^{t_x\hat{X}}\left(\hat{1} + t_y\hat{Y} + \mathcal{O}(t_y^2)\hat{Y}'\right)\mathrm{e}^{t_x\hat{X}}. \tag{2.3}$$

У виразі (2.3) не зроблено жодного наближення. Ми лише припускаємо, що параметри t_x та t_y *існують*. Для обидвох далі описаних наближень вимагається щоб t_y було малим і ми будемо нехтувати величинами порядку $\mathcal{O}(t_y^2)$. Для кожної конкретної моделі мусить бути побудований окремий оператор $\hat{Y}$ з врахуванням цієї вимоги.

Границя сильної анізотропії часто вводиться нестрогим аргументом нехтування некомутативності операторів $\hat{X}$ і $\hat{Y}$ у виразі $\hat{T}$

$$\hat{T} = \mathrm{e}^{t_x\hat{X}}\left(\hat{1} + t_y\hat{Y} + \mathcal{O}(t_y^2)\hat{Y}'\right)\mathrm{e}^{t_x\hat{X}} \underset{\mathcal{O}(t_y^2)=0}{\approx} \mathrm{e}^{t_x\hat{X}}\mathrm{e}^{t_y\hat{Y}}\mathrm{e}^{t_x\hat{X}} \underset{[\hat{X},\hat{Y}]=0}{\approx} \mathrm{e}^{2t_x\hat{X}+t_y\hat{Y}}. \tag{2.4}$$

Більш строго (2.4) може бути отримано через розклади експоненти в ряд при виконанні однієї з умов

$$t_x = t_x(t_y) \in \mathcal{O}(t_y),\ \mathcal{O}(t_y^2) = 0;$$
$$\text{або}$$
$$t_y = t_y(t_x) \in \mathcal{O}(t_x),\ \mathcal{O}(t_x^2) = 0. \tag{2.5}$$

Кожна з умов (2.5) робить залежними між собою t_x та t_y, що накладає певні обмеження на параметри класичної системи (1.1). Часто для наближення сильної анізотропії вводиться *сильніша* за кожну з умов у (2.5) і єдина з можливих, що задовільняє обидві з них одночасно

$$t_x = \lambda t_y,\ \mathcal{O}(t_y^2) = 0\ \ (\text{або еквівалентно}\ \ \mathcal{O}(t_x^2) = 0) \tag{2.6}$$

де λ довільна константа.

Співвідношення $t_x = \lambda t_y$ є зручним для обгрунтування назви наближення - границя сильної анізотропії. Якщо ми розглянемо загалний випадок моделі (1.1) де енергія одного рядка при будь-якій конфігурації пропорційна до e_x і всі можливі енергії міжрядкової взаємодії не менші ніж e_y (крім $E^y(\xi,\xi) = 0$) тоді умова (2.6) вимагає щоб справджувалась рівність

$$\beta e_x = -2\lambda\mathrm{e}^{-\beta e_y}. \tag{2.7}$$

Вимагаючи від $\mathrm{e}^{-\beta e_y}$ бути малим ми вимагаємо e_y бути сильною, а e_x бути слабкою. Зауважимо також, що вимога до $\mathrm{e}^{-\beta e_y}$ бути малим також виконується лише при умові $e_y > 0$, що означає "феромагнітну"взаємодію вздовж осі y.

Зауважимо, що якщо анізотропія є *наближенням* для системи, то пропорція (2.6) є найбільш природньою, оскільки відповідає максимальній ізотропії, при якому наближення ще можливе. Але якщо з певних причин ми вимагаємо сильнішої анізотропії (або анізотропія є властивістю моделі), що не задовільняє (2.6) але виконується один з випадків у (2.5) наближення сильної анізотропії (2.4) також може бути використане.

Випишемо остаточний вигляд Гамільтоніану квантової системи

$$\hat{H}_{sal} = -\frac{1}{\beta}\ln\hat{T} = -\frac{2t_x}{\beta}\hat{X} - \frac{t_y}{\beta}\hat{Y} \tag{2.8}$$

Границя сильної взаємодії вимагає *лише*, щоб t_y було малим і не накладає жодних умов на t_x, але може бути використана для запису явного вигляду квантового Гамільтоніана лише якщо комутатор $[\hat{X},\hat{Y}]$ задовільняє певним умовам: що описані далі. Запишемо оператор $\hat{T}$ у вигляді $\mathrm{e}^{t_x\hat{X}}(1 + t_y\hat{Y})\mathrm{e}^{t_x\hat{X}} = \mathrm{e}^{2t_x\hat{X}+t_y(\hat{Y}+\hat{Z})}$ де $\hat{Z}$ є невідомим оператором: що визначений функцією $\hat{Z} = Z(t_x\hat{X},\hat{Y})$. З розкладу обидвох частин за степенями t_y в ряд Тейлора до двох перших членів [5]

$$e^{2t_x\hat{X}}+t_y e^{t_x\hat{X}}\hat{Y}e^{t_x\hat{X}}$$
$$=e^{2t_x\hat{X}}+\left[\int_0^1 e^{\tau(2t_x\hat{X}+t_y\hat{Y}+t_y\hat{Z})}(\hat{Y}+\hat{Z})e^{(1-\tau)(2t_x\hat{X}+t_y\hat{Y}+t_y\hat{Z})}\right]_{t_y=0}t_y d\tau,$$
$$e^{t_x\hat{X}}\hat{Y}e^{t_x\hat{X}}=\int_0^1 d\tau e^{2\tau t_x\hat{X}}(\hat{Y}+\hat{Z})e^{-2\tau t_x\hat{X}}e^{2t_x\hat{X}}. \tag{2.9}$$

Домножимо зліва і справа на $e^{-t_x\hat{X}}$ і зробимо заміну $\tau\to\frac{\tau+1}{2}$, $\int_0^1 d\tau\to\frac{1}{2}\int_{-1}^1 d\tau$, що приведе нас

$$\hat{Y}=\tfrac{1}{2}\int_{-1}^1 e^{\tau t_x\hat{X}}(\hat{Y}+\hat{Z})e^{-\tau t_x\hat{X}}d\tau=\tfrac{1}{2}\int_{-1}^1\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\tau^n t_x^n\left([\hat{X},\hat{Y}]_n+[\hat{X},\hat{Z}]_n\right)}{n!}d\tau,$$
$$[\hat{A},\hat{B}]_n=[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]_{n-1}],\ \ [\hat{A},\hat{B}]_0=\hat{B}. \tag{2.10}$$

Тепер ми можемо інтегрувати за τ

$$\hat{Y}=\tfrac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1+(-1)^n}{(n+1)!}t_x^n\left([\hat{X},\hat{Y}]_n+[\hat{X},\hat{Z}]_n\right)=\sum_{n=0}^{\infty}t_x^n\frac{[\hat{X},\hat{Y}]_{2n}+[\hat{X},\hat{Z}]_{2n}}{(2n+1)!}. \tag{2.11}$$

Припустимо, що оператор $\hat{Z}$ може бути розкладений як сума комутаторів $\hat{Z}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{A_k}{k!}t_x^k[\hat{X},\hat{Y}]_k$. Ми можемо показати, що функція $Z(t_x\hat{X},\hat{Y})$ є парною щодо першого аргумента

$$\left(e^{t_x\hat{X}}(1+t_y\hat{Y})e^{t_x\hat{X}}\right)^{-1}=\left(e^{2t_x\hat{X}+t_y(\hat{Y}+Z(t_x\hat{X},\hat{Y}))}\right)^{-1}$$
$$=e^{-2t_x\hat{X}-t_y(\hat{Y}+Z(t_x\hat{X},\hat{Y}))}$$
$$\left(e^{t_x\hat{X}}(1+t_y\hat{Y})e^{t_x\hat{X}}\right)^{-1}=e^{-t_x\hat{X}}(1-t_y\hat{Y})e^{-t_x\hat{X}}+\mathcal{O}(t_y^2)$$
$$\approx e^{-2t_x\hat{X}-t_y(\hat{Y}+Z(-t_x\hat{X},\hat{Y}))} \tag{2.12}$$

звідки випливає $Z(t_x\hat{X},\hat{Y})=Z(-t_x\hat{X},\hat{Y})$ що означає рівність нулю усіх непарних коефіцієнтів розкладу $A_{2k+1}\equiv 0$ і ми маємо

$$\hat{Z}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{A_{2k}t_x^{2k}}{2k!}[\hat{X},\hat{Y}]_{2k}. \tag{2.13}$$

Беручи до уваги $\left[\hat{X},\left[\hat{X},\hat{Y}\right]_\alpha\right]_\beta=\left[\hat{X},\hat{Y}\right]_{\alpha+\beta}$

$$\hat{Y}=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{A_{2k}t_x^{2(n+k)}}{(2k)!(2n+1)!}[\hat{X},\hat{Y}]_{2(n+k)}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t_x^{2n}}{(2n+1)!}[\hat{X},\hat{Y}]_{2n}. \tag{2.14}$$

і перепорядковуючи доданки в сумі (добуток Коші) $\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}F(n,k)=\sum_{i=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{i}F(j,i-j)$ можемо записати

$$\hat{Y}=\sum_{i=1}^{\infty}\left(\sum_{j=0}^{i-1}\frac{A_{2(i-j)}}{(2i-2j)!(2j+1)!}\right)t_x^{2i}[\hat{X},\hat{Y}]_{2i}+\sum_{i=0}^{\infty}\frac{t_x^{2i}}{(2i+1)!}[\hat{X},\hat{Y}]_{2i}. \tag{2.15}$$

Прирівнюючи коефіцієнти при однакових степенях t_x отримаємо рівняння для A_{2k}

$$\sum_{j=0}^{i-1}\frac{A_{2(i-j)}}{(2i-2j)!(2j+1)!}+\frac{1}{(2i+1)!}=0 \tag{2.16}$$

з яких вдається записати рекурсивні вирази для A_{2i}

$$A_{2i}=-\frac{1}{2i+1}\sum_{j=1}^{i}C_{2j+1}^{2i+1}A_{2(i-j)},\ \ i\geq 1\ \ A_0=1, \tag{2.17}$$

де $C_{2j+1}^{2i+1}=\frac{(2i+1)!}{(2j+1)!(2i-2j)!}$. Зауважимо, що для чисел Бернуллі існує схоже представлення

$$B_{2i}=-\frac{1}{2i+1}\sum_{j=1}^{i}C_{2j+1}^{2i+1}B_{2(i-j)}+\tfrac{1}{2},\ \ i\geq 1\ \ B_0=1,B_1=-\tfrac{1}{2}. \tag{2.18}$$

Нашою новою задачею є знайти (2.13), що в загальному випадку не може бути зроблено, але при певних умовах вдається записати явно. Ми розглянемо лише системи для яких комутатор $[\hat{X},\hat{Y}]_{2k}$ починаючи з певного k набуває загального вигляду

$$[\hat{X},\hat{Y}]_{2Pr+2l}=\sum_{q=1}^{Q}\hat{L}_{l,q}\left(\hat{z}_{l,q}\right)^{2Pr+2l}\hat{R}_{l,q} \tag{2.19}$$

де $P,Q,r\in\mathbb{N}$, $l=\overline{0,P-1}$, тобто починає періодично повторюватись з періодом P при кожному наступному повторенні генеруючи додаткові однакові множники. Якщо комутатор $[\hat{X},\hat{Y}]_{2Pr+2l}$ набуває загальної форми (2.19) почечинаючи з $r'>1$ ми можемо виділити зайві доданки в (2.13) окремо. Подальший успіх можливий завдяки тому, що вдається встановити генеруючу функцію $a(x)$ коефіцієнтів A_{2k}

$$a(x) \overset{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_{2k}}{2k!} x^{2k} \equiv \frac{x}{\sinh x} - 1, \tag{2.20}$$

звідки ми можемо знайти генеруючу функцію для A_{2Pr+2l}

$$a_{P,l}(x) \overset{\text{def}}{=} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{A_{2Pr+2l}}{(2Pr+2l)!} x^{2Pr+2l} = \frac{1}{P} \sum_{p=0}^{P-1} \mathrm{e}^{-\frac{2i\pi pl}{P}} a\left(x\mathrm{e}^{\frac{i\pi p}{P}}\right) \tag{2.21}$$

Врешті невідомий оператор $\hat{Z}$ можна записати явно

$$\hat{Z} = \sum_{q=1}^{Q} \sum_{l=0}^{P-1} \hat{L}_{l,q} a_{P,l}(t_x \hat{z}_{l,q}) \hat{R}_{l,q} \tag{2.22}$$

і Гамільтоніан у границі сильної взаємодії має вигляд

$$\hat{H}_{sil} = -\frac{2t_x}{\beta}\hat{X} - \frac{t_y}{\beta}\hat{Y} - \frac{t_y}{\beta} \sum_{q=1}^{Q} \sum_{l=0}^{P-1} \hat{L}_{l,q} a_{P,l}(t_x \hat{z}_{l,q}) \hat{R}_{l,q}. \tag{2.23}$$

Границя сильної анізотропії отримується як і очікувалось, оскільки $a_{P,l}(x) \in \mathcal{O}(x^2)$.

3. Двовимірна спін-$\frac{1}{2}$ модель Ізинга

В цьому розділі ми знайдемо квантові Гамільтоніани в обидвох описаних вище границях. Почнемо з енергії класичної системи

$$E = -\sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N} J_x \sigma_{m,n} \sigma_{m,n+1} + J_y \sigma_{m,n} \sigma_{m+1,n}, \tag{3.1}$$

де $\sigma_{m,n}$ може набувати значень $\pm\frac{1}{2}$. Конфігурація в кожному рядку m задається змінними $\{\sigma_{m,n}\}_{n=\overline{1,N}}$ і може набувати одного з $\mathbb{L} = 2^N$ можливих значень. Ми будемо позначати конфігурації двох послідовних рядків через $\{\sigma_n\}$ та $\{\sigma'_n\}$. Розіб'ємо суму на дві частини

(2.1)

$$\frac{E^x(\{\sigma_n\})}{2} = -\sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2} J_x \sigma_n \sigma_{n+1},$$

$$E^y(\{\sigma_n\},\{\sigma'_n\}) = -\sum_{n=1}^{N} J_y \sigma_n \sigma'_n. \tag{3.2}$$

Гільбертовий простір для побудови квантової моделі генерується базисом $\{|\xi\rangle\}_{\xi=\overline{1,2^N}} = \{\otimes_{n=1}^{N} |\sigma_n\rangle\}_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2},\sigma_2=\pm\frac{1}{2},\ldots,\sigma_N=\pm\frac{1}{2}}$.

Оператор, що відповідає діагональній частині трансфер-матриці має вигляд

$$\hat{T}^x = \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \ldots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2} \bigotimes_{n=1}^{N} |\sigma_n\rangle \mathrm{e}^{\frac{\beta J_x}{2} \sum\limits_{j=1}^{N} \sigma_j \sigma_{j+1}} \bigotimes_{n=1}^{N} \langle\sigma_n|$$
$$= \mathrm{e}^{\frac{\beta J_x}{2} \sum\limits_{j=1}^{N} \sum\limits_{\sigma_1=\pm 1/2} \ldots \sum\limits_{\sigma_N=\pm 1/2} \bigotimes\limits_{n=1}^{N} |\sigma_n\rangle \sigma_j \sigma_{j+1} \bigotimes\limits_{n=1}^{N} \langle\sigma_n|} = \mathrm{e}^{\frac{\beta J_x}{2} \sum\limits_{j=1}^{N} \hat{s}^z_j \hat{s}^z_{j+1}} \tag{3.3}$$

Де ми ввели спінові оператори $\hat{s}^z_n = \sum_{\sigma_n=\pm\frac{1}{2}} |\sigma_n\rangle \sigma_n \langle\sigma_n|$ і опускаємо тривіальні прямі добутки одиничних операторів $\hat{s}^z_j \equiv \overbrace{\hat{1}\otimes\ldots\otimes\hat{1}}^{j-1} \otimes \hat{s}^z_j \otimes \overbrace{\hat{1}\otimes\ldots\otimes\hat{1}}^{N-j}$. Позадіагональну частину записати складніше

$$\hat{T}^y = \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \ldots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2} \sum_{\sigma'_1=\pm 1/2} \ldots \sum_{\sigma'_N=\pm 1/2} \bigotimes_{n=1}^{N} |\sigma_n\rangle \mathrm{e}^{\beta J_y \sum_{j=1}^{N} \sigma_j \sigma'_j} \bigotimes_{n=1}^{N} \langle\sigma'_n| \tag{3.4}$$

Ми не можемо внести прямих добутків під експоненту. Для побудови оператора $\hat{T}_y$ розділимо усі можливі матричні елементи $\hat{T}_y$ за кількістю відмінних значень $\{\sigma_n\}$ and $\{\sigma'_n\}$. Якщо сусідні рядки мають однакову конфігурацію, ми маємо діагональний елемент $\hat{Y}$ рівний $\frac{-NJ_y}{4}$. Зсуваючи усі значення енергії на цю величину ми отримаємо потрібну умову $\bigotimes\limits_{n=1}^{N} \langle\sigma_n|\hat{T}_y \bigotimes\limits_{n=1}^{N} |\sigma_n\rangle = 1$. Якщо тільки на одному вузлі n змінні $\{\sigma\}$ і $\{\sigma_n\}$ відмінні $\{\sigma_n = \sigma'_n\}_{n=\overline{1,j-1},\overline{j+1,N}}, \sigma_j = -\sigma'_j$ енергія збільшується на величину $\frac{J_y}{2}$ і матричний елемент $\hat{T}^y$ рівний $\mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}}$. Всі матричні елементи, що відповідають відмінним змінним $\{\sigma\}$ і $\{\sigma_n\}$ на двох вузлах рівні $\left(\mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}}\right)^2$ і так далі, якщо змінні $\{\sigma\}$

та $\{\sigma'\}$ відрізняються на r вузлах, то $T_{\{\sigma\},\{\sigma'\}} = \left(\mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}}\right)^r$. Тепер очевидно як параметр t_y повинен бути вибраний. Якщо $t_y = \mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}}$ є малим ми можемо побудувати оператор $\hat{Y}$ який має усі матричні елементи рівні нулю, крім тих, які відповідають різниці між рядками тільки на одному вузлі j. Усі інші позадіагональні матричні елементи які є $\mathcal{O}(t_y^2)$ згрупуємо у суму, що визначить неважливий оператор $\hat{Y}'$ якого ми не маємо потреби шукати явно. Сказане, може бути зроблене переписуючи суму (3.4)

$$
\begin{aligned}
\hat{T}^y = & \overbrace{\sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2}}^{2^N \text{ доданків}} \bigotimes_{n=1}^{N} |\sigma_n\rangle \bigotimes_{n=1}^{N} \langle\sigma_n| \\
& + t_y \overbrace{\sum_{j=1}^{N} \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2}}^{N\cdot 2^N \text{ доданків}} \\
& \bigotimes_{n=1}^{j-1} |\sigma_n\rangle \bigotimes |\sigma_j\rangle \bigotimes_{n=j+1}^{N} |\sigma_n\rangle \bigotimes_{n=1}^{j-1} \langle\sigma_n| \bigotimes \langle -\sigma_j| \bigotimes_{n=j+1}^{N} \langle\sigma_n| \\
& + \mathcal{O}\left(t_y^2\right) \overbrace{\sum_{\substack{\text{всі інші} \\ \text{конфігурації}}}}^{(\sum_{r=2}^{N} C_r^N \equiv 2^N - N - 1)\cdot 2^N \text{ доданків}} \bigotimes_{n=1}^{N} |\sigma_n\rangle \bigotimes_{n=1}^{N} \langle\sigma'_n| \\
= & \hat{1} + t_y \hat{Y} + \hat{Y}'
\end{aligned}
\tag{3.5}
$$

При бажанні $\hat{Y}'$ може бути розбитий на суми $\propto t_y^r$ по C_r^N доданків у кожному. Тепер в операторі $\hat{Y}$ можна легко впізнати суму спінових операторів

$$
\begin{aligned}
\hat{Y} = & \sum_{j=1}^{N} \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2} \bigotimes_{n=1}^{j-1} |\sigma_n\rangle \bigotimes |\sigma_j\rangle \bigotimes_{n=j+1}^{N} |\sigma_n\rangle \\
& \bigotimes_{n=1}^{j-1} \langle\sigma_n| \bigotimes \langle -\sigma_j| \bigotimes_{n=j+1}^{N} \langle\sigma_n| = 2\sum_{j=1}^{N} \hat{s}_j^x .
\end{aligned}
\tag{3.6}
$$

З (3.3) і (3.6) t_x, t_y, $\hat{X}$, $\hat{Y}$ може бути записано

$$
t_x = \frac{\beta J_x}{2}, \quad t_y = \mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}}, \quad \hat{X} = \sum_{j=1}^{N} \hat{s}_j^z \hat{s}_{j+1}^z, \quad \hat{Y} = \sum_{j=1}^{N} 2\hat{s}_j^x . \tag{3.7}
$$

В границі сильної анізотропії ми отримали Гамільтоніан спін-$\frac{1}{2}$ ланцюжка в поперечному полі.

$$
\hat{H}_{sal} = -\frac{2}{\beta} t_x \hat{X} - \frac{t_y}{\beta} \hat{Y} = -\sum_{j=1}^{N} J_x \hat{s}_j^z \hat{s}_{j+1}^z - \frac{2}{\beta} \mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}} \hat{s}_j^x . \tag{3.8}
$$

Для того, щоб отримати Гамільтоніан в границі сильної взаємодії запишемо комутатор $[\hat{X}, \hat{Y}]_{2k}$ для $k \geq 1$

$$
[\hat{X}, \hat{Y}] = 2i \sum_{j=1}^{N} (\hat{s}_j^y \hat{s}_{j+1}^z + \hat{s}_j^z \hat{s}_{j+1}^y), \quad [\hat{X}, \hat{Y}]_{2k} = 2\sum_{j=1}^{N} \hat{s}_j^x (1/2 + 2\hat{s}_{j-1}^z \hat{s}_{j+1}^z). \tag{3.9}
$$

Рівняння (2.19),(2.21) стає дуже простим $P, Q = 1$, $l = 0$, $\hat{L}_{0,1} = 1$, $\hat{z}_{0,1} = 1$, $\hat{R}_{0,1} = 2\sum_{j=1}^{N} \hat{s}_j^x (1/2 + 2\hat{s}_{j-1}^z \hat{s}_{j+1}^z)$, $a_{1,0}(t_x) = a(t_x)$

$$
\hat{H}_{sil} = -\sum_{j=1}^{N} J_x \hat{s}_j^z \hat{s}_{j+1}^z + \frac{2}{\beta} \mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}} \hat{s}_j^x + \frac{2}{\beta} \mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}} a\left(\frac{\beta J_x}{2}\right) \hat{s}_j^x (1/2 + 2\hat{s}_{j-1}^z \hat{s}_{j+1}^z). \tag{3.10}
$$

4. Підсумок

Для порівняння результатів наближень можна знайти критичну температуру класичної двовимірної моделі Ізинга в обидвох наближеннях. Точне значення β_{ex} відоме і визначається співвідношенням

$$
\sinh \frac{\beta_{ex} J_x}{2} \sinh \frac{\beta_{ex} J_y}{2} = 1. \tag{4.1}
$$

У наближенні сильної анізотропії

$$
\beta_{sal} J_x = 4\mathrm{e}^{-\frac{\beta_{sal} J_y}{2}}. \tag{4.2}
$$

У наближенні сильної взаємодії ми отримали частковий випадок узагальненої XY моделі для якого можна знайти за допомогою ферміонізації [6] критичного поперечного поля, що відповідатиме критичній температурі класичної системи. Несподіваним на перший погляд є те, що значення критичної температури співпвдає із значенням отриманим в наближенні сильної анізотропії $\beta_{sil} \equiv \beta_{sal}$. Зрозуміти чому так відбувається можна з виразу для точного значення критичної температури (4.1). Якщо ми вимагаємо від $\mathrm{e}^{-\frac{\beta J_y}{2}}$ бути малим, то з рівняння (4.1) випливає що βJ_x повинно бути великим - тобто ми приходимо до наближення сильної анізотропії. Слід зауважити, що тотожність наближень для пошуку критичної температури не означає: що наближення сильної взаємодії і сильної анізотропії дають однакові результати для інших термодинамічних величин.

Література

1. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. - М.: Мир, 1985. - 486 с.
2. E. Carlon, G. Mazzeo, H. van Beijeren, Phys. Rev. B 55, 757 (1989).
3. J.B. Kogut, Rev. Mod. Phys. 51 (1979), 659.
4. A. Berman and R. J. Plemmons, Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences, Academic Press, 1979.
5. Ю. Л. Далецкий, УМН. 12 (1957), 182.
6. M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 46 (1971), 1337.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alrting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- “Referativnyi Zhurnal”
- “Dzherelo”

CONTACT INFORMATION:
Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua http://www.icmp.lviv.ua