

Спектральная плотность модели Изинга на гиперкубической решетке

Б.В. Крыжановский¹, Л.Б. Литинский¹

¹Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Нахимовский проспект 38-1, Москва, Россия, 117218

Аннотация. Собственные значения гамильтониана многомерной модели Изинга выражаются через константы меж-спинового взаимодействия и собственные значения одномерного гамильтониана. Для периодических граничных условий точные аналитические выражения могут быть получены практически для произвольного дальнего действия.

1. Введение

Модель Изинга постоянно находится в фокусе внимания исследователей. Отчасти это связано с использованием модели для проверки новых методов вычисления свободной энергии и критических характеристик спиновой системы. Отчасти – с тем, что, несмотря на кажущуюся простоту, в ряде случаев модель не поддается точному решению уже около ста лет [1 - 5].

В нашей работе, в предположении периодических граничных условий, получены точные выражения для собственных значений модели Изинга на гиперкубической решетке, когда учитывается взаимодействие с *произвольно большим* числом ближайших соседей. Собственные значения многомерного гамильтониана Изинга выражаются через константы взаимодействия между спинами и собственные значения одномерного гамильтониана, а собственные векторы многомерного гамильтониана являются кронекеровыми произведениями собственных векторов одномерного гамильтониана. Выражения для собственных значений и собственных векторов одномерного гамильтониана хорошо известны.

В работе рассматриваются решетки следующих размерностей: $d=1$ - одномерная модель Изинга, $d=2$ - двумерная (или планарная) модель Изинга, и $d=3$ - трехмерная (или кубическая) модель Изинга. Обобщение полученных результатов на решетки больших размерностей проблемы не составляет.

Число спинов, взаимодействие с которыми учитывается в задаче, задается числом вовлеченных в рассмотрение координационных сфер [6]. Для фиксированного начального узла решетки k -я координационная сфера включает все узлы, отстоящие от него на расстояние, занимающее k -е место в возрастающей последовательности всех различных расстояний между узлами решетки. Спины в узлах k -й координационной сферы одинаково взаимодействуют со спином в начальном узле – соответствующую константу взаимодействия будем обозначать w_k . Подчеркнем, что каждая задача характеризуется своим собственным набором величин $\{w_k\}$. Координационные сферы с небольшими номерами k имеют традиционные названия: 1-я координационная сфера – это «ближайшие соседи», 2-я

координационная сфера – соседи, следующие за ближайшими. Иногда будет использоваться эта терминология.

2. 1D-модель Изинга

Разберем одномерную модель Изинга, которой описывается линейная цепочка n связанных друг с другом спинов $s_i = \pm 1$, $i = 1, \dots, n$.

Периодические граничные условия означают, что линейную цепочку фактически замыкают: последний, n -й спин цепочки, объявляют ближайшим соседом первого спина «слева»; предпоследний, $(n-1)$ -й спин цепочки оказывается вторым соседом первого спина слева и т.д. - см. рисунок 1. Периодические граничные условия рассматривают чаще всего.

Обозначим $\mathbf{J}(k)$ матрицу связи одномерной модели, в которой учитывается взаимодействие каждого спина *только* со спинами k -й координационной сферы. Матрицы $\mathbf{J}(1)$ и $\mathbf{J}(2)$, например, имеют вид:

$$\mathbf{J}(1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}(2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ 1 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрица $\mathbf{J}(k)$ симметрична, в ее верхнем правом треугольнике единицы заполняют k -ю и $(n-k)$ -ю наддиагонали, параллельные главной диагонали матрицы. Ясно, что $\mathbf{J}(k) \equiv \mathbf{J}(n-k)$, поэтому $k \leq k_0 = \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor$. С помощью матриц $\{\mathbf{J}(k)\}_1^{k_0}$ записывают матрицу гамильтониана одномерной модели, в которой учитывается взаимодействие w_1 со спинами первой координационной сферы, взаимодействие w_2 со спинами второй координационной сферы, и так далее – взаимодействие w_k со спинами k -й координационной сферы:

$$\mathbf{H}_1 = w_1 \cdot \mathbf{J}(1) + w_2 \cdot \mathbf{J}(2) + \dots + w_{k_0} \cdot \mathbf{J}(k_0). \quad (1)$$

Несложная тригонометрия позволяет получить выражения для собственных значений и собственных векторов матрицы $\mathbf{J}(1)$ - они давно известны [7], [8]:

$$\mathbf{J}(1) \cdot \mathbf{f}_i = \lambda_i(1) \cdot \mathbf{f}_i, \text{ где } \begin{cases} \lambda_i(1) = 2 \cdot \cos \varphi_i, & \varphi_i = \frac{2\pi \cdot (i-1)}{n}; \\ \mathbf{f}_i = \left(f_i^{(1)}, \dots, f_i^{(n)} \right)^+, & f_i^{(j)} = \frac{\cos(j-1)\varphi_i + \sin(j-1)\varphi_i}{\sqrt{n}}, \end{cases} \quad i, j = 1, 2, \dots, n. \quad (2)$$

Воспользуемся матричным равенством:

$$\mathbf{J}(k) \cdot \mathbf{J}(l) = \begin{cases} \mathbf{J}(k+l) + \mathbf{J}(k-l), & \text{когда } k > l \\ \mathbf{J}(2k) + 2 \cdot \mathbf{I}, & \text{когда } k = l \end{cases} \quad (3)$$

где $\mathbf{I} = \text{diag}(1, 1, \dots, 1)$ - единичная $(n \times n)$ -матрица. С его помощью легко показать, что матрица $\mathbf{J}(k)$ является полиномом k -й степени от матрицы $\mathbf{J}(1)$. Следовательно, все эти матрицы коммутируют, и все они обладают одним и тем же набором собственных векторов $\{\mathbf{f}_i\}_1^n$ (2).

С помощью (3) можно получить выражение для собственных значений матрицы $\mathbf{J}(k)$:

$$\lambda_i(k) = 2 \cdot \cos(k \cdot \varphi_i), \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad k = 1, 2, \dots, k_0 = \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor. \quad (4)$$

Формулы (2), (4) позволяют в явном виде вычислить собственные значения одномерного гамильтониана $\mathbf{H}_1$ (1):

$$\lambda_i(\mathbf{H}_1) = w_1 \cdot \lambda_i(1) + \dots + w_k \cdot \lambda_i(k) = 2 \sum_{l=1}^k w_l \cdot \cos(l \cdot \varphi_i), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Здесь $\{w_l\}_1^k$ - внешние параметры задачи, которыми определяется взаимодействие со спинами первых k координационных сфер. Задавшись тем или иным видом функциональной зависимости меж-спинового взаимодействия w_k от расстояния между узлами решетки – $w(r) \sim 1/r^{1+\alpha}$, $w(r) \sim \exp(-f(r))$ и т.д. – можно получить асимптотическое выражение для спектральной плотности одномерной модели Изинга.

3. 2D- и 3D-модели Изинга

Основные построения для планарной модели Изинга поясним на примере, когда учитывается взаимодействие со спинами пяти ближайших координационных сфер. Пять наименьших расстояний между узлами квадратной решетки равны $l_1 = 1$, $l_2 = \sqrt{2}$, $l_3 = 2$, $l_4 = \sqrt{5}$ и $l_5 = 2\sqrt{2}$. На рисунке 2 цифрами помечены узлы решетки, расстояния до которых от начальной точки (нижний левый узел) равны этим числам. Константы взаимодействия со спинами соответствующих координационных сфер обозначим $\{w_l\}_1^5$.



Рисунок 1. Одномерная цепочка спинов.

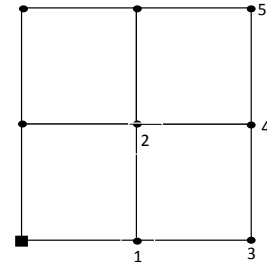


Рисунок 2. Квадратная решетка: пять ближайших соседей начальной точки.

Построив $(n^2 \times n^2)$ -матрицу гамильтониана $\mathbf{H}_2$, увидим, что она имеет блочно-циклическую структуру. «Строительными блоками» матрицы $\mathbf{H}_2$ являются $(n \times n)$ -матрицы $\mathbf{A}_1, \mathbf{B}_1, \mathbf{C}_1, \dots$, образованные линейными комбинациями введенных в предыдущем пункте матриц $\mathbf{J}(k)$. Под циклическостью матрицы $\mathbf{H}_2$ подразумевается, что каждая ее последующая блочная строка получается циклическим сдвигом предыдущей строки на одну позицию вправо. В рассматриваемом случае матрица 2D-гамильтониана имеет вид:

$$\mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{C}_1 & 0 & \dots & \mathbf{C}_1 & \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{C}_1 & \dots & 0 & \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{C}_1 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{C}_1 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{C}_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_1 & \mathbf{C}_1 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_1 \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \begin{aligned} \mathbf{A}_1 &= w_1 \mathbf{J}(1) + w_3 \mathbf{J}(2), \\ \mathbf{B}_1 &= w_1 \mathbf{I} + w_2 \mathbf{J}(1) + w_4 \mathbf{J}(2), \\ \mathbf{C}_1 &= w_3 \mathbf{I} + w_4 \mathbf{J}(1) + w_5 \mathbf{J}(2). \end{aligned}$$

Собственными векторами таких матриц являются кронекеровы произведения собственных векторов одномерной модели Изинга $\{\mathbf{f}_i\}_1^n$ (2):

$$\mathbf{F}_{ij} = \mathbf{f}_i \otimes \mathbf{f}_j = (f_i^{(1)} f_j^{(1)}, f_i^{(1)} f_j^{(2)}, \dots, f_i^{(1)} f_j^{(n)}, f_i^{(2)} f_j^{(1)}, f_i^{(2)} f_j^{(2)}, \dots, f_i^{(2)} f_j^{(n)}, \dots, f_i^{(n)} f_j^{(1)}, f_i^{(n)} f_j^{(2)}, \dots, f_i^{(n)} f_j^{(n)})^+$$

где $i, j = 1, 2, \dots, n$.

Несложно вычислить соответствующие собственные значения – в данном случае они равны:

$$\mu_{ij} = w_1 (\lambda_i(1) + \lambda_j(1)) + w_2 \lambda_i(1) \lambda_j(1) + w_3 (\lambda_i(2) + \lambda_j(2)) + w_4 (\lambda_i(1) \lambda_j(2) + \lambda_j(1) \lambda_i(2)) + w_5 \lambda_i(2) \lambda_j(2),$$

где $\lambda_i(1)$ и $\lambda_i(2)$ определяются в (2) и (4).

По той же схеме рассматривается и трехмерная модель Изинга. Сначала необходимо аккуратно распределить узлы трехмерной решетки по координационным сферам, и затем построить матрицу гамильтониана $\mathbf{H}_3$. Полученная матрица будет иметь блочно-циклическую структуру с $(n^2 \times n^2)$ -матрицами в качестве «строительных блоков». Собственными векторами матрицы гамильтониана будут кронекеровы произведения:

$$\mathbf{F}_{ijk} = \mathbf{F}_{ij} \otimes \mathbf{f}_k = \mathbf{f}_i \otimes \mathbf{f}_j \otimes \mathbf{f}_k, \text{ где } i, j, k = 1, 2, \dots, n.$$

Выпишем выражение для собственных значений трехмерного гамильтониана, в котором учитывается взаимодействие со спинами пяти ближайших координационных сфер $\{\mathbf{w}_i\}_1^5$:

$$\begin{aligned} \mu_{ijk} = & w_1 (\lambda_i(1) + \lambda_j(1) + \lambda_k(1)) + w_2 (\lambda_i(1)\lambda_j(1) + \lambda_j(1)\lambda_k(1) + \lambda_k(1)\lambda_i(1)) + w_3 \lambda_i(1)\lambda_j(1)\lambda_k(1) + \\ & + w_4 [\lambda_i(2) + \lambda_j(2) + \lambda_k(2)] + w_5 [(\lambda_i(1) + \lambda_j(1))\lambda_k(2) + (\lambda_j(1) + \lambda_k(1))\lambda_i(2) + (\lambda_k(1) + \lambda_i(1))\lambda_j(2)]. \end{aligned}$$

Полученные точные выражения для собственных значений создают основу для исследования спектральной плотности многомерной модели Изинга.

4. Благодарности

Работа выполнена при поддержке грантом РФФИ № 18-07-00750.

5. Литература

- [1] Бэкстер, Р. Точно решаемые модели статистической физики / Р. Бэкстер – Москва: Мир, 1985.
- [2] Стэнли, Г. Фазовые переходы и критические явления / Г. Стэнли – Москва: Мир, 1973.
- [3] Dotsenko, V.S. Introduction to the Theory of Spin-Glasses and Neural Networks / V.S. Dotsenko // Singapore: World Scientific, 1994.
- [4] Hartmann, A.K. New Optimization Algorithms in Physics / A.K. Hartmann, H. Rieger – Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co., 2004.
- [5] Dixon, J.M. Exact eigenvalues of the Ising Hamiltonian in one-, two- and three-dimensions in the absence of magnetic field / J.M. Dixon, J.A. Tuszynski, M.L.A. Nip // Physica A. – 2001. – Vol. 289. – P. 137-156.
- [6] Нокс, Р.С. Симметрия в твердых телах / Р.С. Нокс, А. Голд – Москва: Наука, 1970.
- [7] Волькенштейн, М.В. Колебания молекул / М.В. Волькенштейн, Л.А. Грибов, М.А. Ельяшевич, Б.И. Степанов – Москва: Наука, 1972.
- [8] Крыжановский, Б.В. Собственные значения матрицы связи модели Изинга: учет взаимодействия с соседями, следующими за ближайшими / Б.В. Крыжановский, Л.Б. Литинский // Доклады Академии наук. – 2019. – Т. 489, № 3. – С. 26-29.

Spectral density for Ising Model on hypercube lattice

B.V. Kryzhanovsky¹, L.B. Litinskii¹

¹Scientific Research Institute for Systems Analysis RAS, Nakhimov street 38/1, Moscow, Russia, 117280

Abstract. For the Hamiltonian of multidimensional Ising system we express the eigenvalues in terms of the spin-spin interaction constants and the well-known eigenvalues of the one-dimensional spin Hamiltonian. In the case of periodic boundary conditions, we can obtain exact analytic expressions for eigenvalues of the multidimensional Hamiltonian for an arbitrary long-range interaction.