ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Температура фазового перехода в некоторых решеточных моделях

А. О. Шишанин[1, *]

[1] *Московский энергетический институт, кафедра высшей математики*
Россия, 111250, Россия, г. Москва, Красноказарменная улица, дом 14, стр. 1

(Поступила в редакцию 02.06.2022; после доработки 29.10.2022; принята к публикации 30.10.2022)

Рассмотрен способ вычисления температуры фазового перехода, использующий только одну ячейку. Этот метод проверен для различных моделей: двумерной модели Изинга на треугольной, шестиугольной и тетраэдральной решетках, трехпозиционной модели Поттса на квадратной решетке. В частности, в модели Изинга для треугольной решетки воспроизведен точный ответ. Также этим методом проведен анализ некоторых многоспиновых моделей.

PACS: 64.60.-A. УДК: 538.91.
Ключевые слова: модель Изинга, модель Поттса, многоспиновая модель, критическая температура, критические индексы, конформная теория поля.

DOI: 10.55959/MSU0579-9392.78.2320101

ВВЕДЕНИЕ

Одним из подходов к квантовой теории поля, восходящий еще к Каданову, Вильсону и Полякову, являются диаграммная техника и метод ренормализационной группы в теории критических явлений [1–7]. Это позволяет с хорошей точностью, сравнимой с численными экспериментами, вычислить критические индексы различных моделей. С другой стороны, известно большое количество двумерных точно решаемых моделей статистической физики, в которых можно вычислить температуру фазового перехода и статистическую сумму. В некоторых случаях удается также найти корреляционные функции. Самый яркий пример — это двумерная модель Изинга без магнитного поля в точке фазового перехода. Здесь были вычислены статистическая сумма [8] и корреляционные функции [9]. Более того, в точке фазового перехода d-мерная модель Изинга описывается теорией несвободного скалярного поля [10], а двумерная модель Изинга воспроизводится свободными безмассовыми майорановскими фермионами. Вдали от критической температуры двумерная модель Изинга тождественна свободным массивным фермионам. Отметим, что многие двумерные точнорешаемые модели описываются конформными минимальными моделями [11–14]. Среди двумерных конформных теорий поля минимальные модели занимают особое положение. Такие модели $M(p, q)$ описываются двумя взаимно простыми числами p и q. Унитарными модели становятся, когда $q = p + 1$. Модель Изинга в критической точке описывается $M(3, 4)$, трехкритическая модель Изинга — $M(4, 5)$, трехпозиционная модель Поттса — $M(5, 6)$. Двумерные (супер)конформные теории поля также очень важны в теориях струн и суперструн [15].

Значительный интерес для науки представляет поиск многомерных точнорешаемых решеточных моделей. Много десятков лет наибольшее внимание исследователей привлекает нахождение точного решения трехмерной модели Изинга. Долгое время в этой задаче не было значительного продвижения, кроме численных результатов. Значительный прогресс был достигнут Рычковым с соавторами [16, 17]. Используя технику конформного бутстрапа, они нашли оценки для конформных размерностей основных операторов в этой модели. Из этих конформных размерностей можно найти критические индексы.

1. МОДЕЛИ ИЗИНГА И ПОТТСА НА РАЗНЫХ РЕШЕТКАХ

Напомним, что двумерная модель Изинга описывает фазовый переход второго рода ферромагнетик–парамагнетик. В присутствии магнитного поля с напряженностью h гамильтониан этой модели имеет вид

$$H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i. \qquad (1)$$

Классические спины (диполи) σ_i лежат в узлах некоторой решетки и принимают значения 1. Первая сумма в гамильтониане модели Изинга берется по ближайшим соседям. J — обменный интеграл, который положителен для ферромагнетика и отрицателен для антиферромагнетика. Точку фазового перехода в двумерных моделях Изинга можно найти из соображений дуальности. Еще в середине двадцатого века Крамерс и Ванье вывели следующее соотношение, связывающее температуры на дуальных решетках:

$$\sinh 2K \sinh 2\tilde{K} = 1, \qquad (2)$$

* E-mail: guaicura@gmail.com

где $K = J/T$, а $\tilde{K}$ рассматривается для дуальной решетки. Квадратная решетка является самодуальной $K = \tilde{K}$, и это позволяет найти температуру фазового перехода сразу как

$$T_c = \frac{2J}{\log(1+\sqrt{2})}. \tag{3}$$

Для других решеток этот вопрос более тонкий и нужны дополнительные аргументы [8]. Для треугольной решетки, которая дуальна шестиугольной, критическая температура равна

$$T_c = -\frac{4J}{\log 3}. \tag{4}$$

Это соответствует антиферромагнитному случаю.

В [18] был предложен очень простой способ вычисления критической температуры в модели Изинга, который подробно изложен для квадратной и кубической решеток в [19, 20]. Можно рассмотреть вместо всей решетки только одну ячейку. Здесь могут быть упорядоченные и неупорядоченные состояния (конфигурации). Для упорядоченных конфигураций при трансляции получается изотропная бесконечная решетка. Изотропную решетку невозможно получить для неупорядоченных состояний. Тогда можно приравнять статистические суммы для этих двух типов конфигураций. Удивительно, что точный ответ для критической температуры получается в случае квадратной [18, 19] и треугольной решеток. Треугольный случай особенно прост, поскольку там имеются только два типа конфигураций. Первый тип — это две упорядоченные конфигурации, когда классические спины направлены в одну сторону. Общая энергия здесь $-3J$. Второй тип — когда один из спинов направлен в другую сторону, чем остальные. Имеется 6 таких конфигураций с энергией J. Равенство статистических сумм

$$2e^{\frac{3J}{T}} = 6e^{-\frac{J}{T}} \tag{5}$$

дает точный ответ (4). Это вычисление критической температуры в модели Изинга на треугольной решетке методом, предложенным в [18], было впервые проделано автором.

Для шестиугольной ячейки имеются два типа упорядоченных конфигураций с энергией $6J$ и $-6J$, которых по две. Все остальные конфигурации имеют энергию либо $2J$, либо $-2J$. В результате имеется равенство для нахождения критической температуры:

$$2(e^{-\frac{6J}{T}} + e^{\frac{6J}{T}}) = 36e^{-\frac{2J}{T}} + 24e^{\frac{2J}{T}}. \tag{6}$$

Здесь критическое K равно 0.6476, в то время как точное значение

$$K = \frac{1}{2}\log(2+\sqrt{3}) = 0.6585.$$

Рассмотрим трехмерную модель Изинга на тетраэдральной решётке. Здесь имеются всего три возможности для конфигураций. Полностью заполненная одним типом спинов соответствует упорядоченной конфигурации. Вторая возможность получается, когда спин одного типа находится в вершине тетраэдра. В последней возможности имеются по два спина разных типов. Уравнение на критическую температуру в этом случае будет таким:

$$2e^{\frac{-6J}{T}} = 8 + 6e^{\frac{4J}{T}}. \tag{7}$$

Это дает значение критической температуры $-3.71747J$, что соответствует антиферромагнетику. В [18, 19] высказывается предположение, что для других типов объемных решеток тоже можно найти температуру фазового перехода. Для кубической решетки [20] авторы вводили дополнительный коэффициент для конфигурации, чтобы учесть упорядоченность.

Модели Поттса [8, 21, 22] с гамильтонианом как в модели Изинга, в которых спин принимает q различных значений (например, 0, 1, ..., $q-1$), тоже могут быть исследованы таким способом. Напомним, что критическая температура для квадратной решетки в модели Поттса задается формулой

$$T_c = \frac{2J}{\log(1+\sqrt{q})}. \tag{8}$$

Двумерные модели Поттса с $q = 2, 3, 4$ имеют фазовый переход второго рода и являются конформными теориями поля [11–14]. Они являются унитарными минимальными моделями с центральным зарядом

$$c = 1 - \frac{6}{p(p+1)}, \text{где} \quad \sqrt{q} = 2\sin\left(\frac{\pi}{2}\frac{p-1}{p+1}\right). \tag{9}$$

Случай $q \to 1 (c = 0)$ описывает перколяции [23, 24]. Когда $q = 4$, то $p = \infty$ и $c = 1$. При $q > 4$ происходит фазовый переход первого рода.

Рассмотрим трехпозиционную модель Поттса с $q = 3$. Классические спины принимают значения 0, 1, 2. Упорядоченные конфигурации (их 9) такие же, как в модели Изинга с двумя различными спинами. Все остальные конфигурации (их 72) — неупорядоченные. Уравнение на равенство статсумм принимает вид многочлена

$$x^{16} - 4x^{12} - 4x^9 + 2x^8 - 12x^6 - 11x^4 - \\ - 8x^3 - 12x^2 - 4x - 7 = 0, \tag{10}$$

где $x = e^{J/T}$. У этого многочлена есть корень 1.5725, когда точный ответ $\sqrt{1+\sqrt{3}} \approx 1.6529$.

2. МНОГОСПИНОВЫЕ МОДЕЛИ

Многоспиновые решеточные модели интересны из-за их связей с вершинными моделями статистической механики [8]. Рассмотрим на квадратной решетке четырехспиновую модель Каданова–Вегнера с гамильтонианом

$$H = -J_2 \sum_{i,j} \sigma_i\sigma_j - J_4 \sum_{i,j,k,l} \sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l. \tag{11}$$

Здесь первое изинговское слагаемое берётся для взаимодействия ближайших соседей, а второе — для одной грани. Точное выражение для критического поведения этой модели описывается формулой [25]

$$\sinh 2K_c = e^{-2\lambda K_c}, \tag{12}$$

где $K = J_2/T$ и $\lambda = J_4/J_2$. Это уравнение показывает, что в данной модели нет универсальности. В частности, критические индексы являются некоторыми функциями параметра λ. Для одной ячейки получается следующее уравнение на критическую температуру

$$\sinh 2K = e^{-\lambda K}. \tag{13}$$

Сравнение двух подходов иллюстрирует следующая таблица.

λ	0.001	0.1	0.5	1	10	100
K	0.440	0.413	0.333	0.275	0.088	0.017
K_c	0.440	0.426	0.377	0.333	0.132	0.029

Как и ожидалось, при малых λ имеется хорошее согласие.

Рассмотрим трехспиновую модель [8, 26], которая называется моделью Бакстера–Ву, с гамильтонианом

$$H = -J_3 \sum_{i,j,k} \sigma_i \sigma_j \sigma_k. \tag{14}$$

Здесь узлы i, j, k решетки образуют правильный треугольник и суммирование ведется по всем граням решетки. Эта модель в точке фазового перехода является конформной с центральным зарядом c, равным 1. Критическая температура здесь такая же как у модели Изинга на квадратной решетке. Двумерная модель не может быть исследована с помощью метода, предложенного в [18]. Для трехмерной модели рассмотрим одну ячейку тетраэдра. Здесь будут те же самые конфигурации, что и в тетраэдральной модели Изинга, однако энергия у них будет другой. Уравнение на точку фазового перехода имеет вид

$$e^{\frac{4J}{T}} + e^{-\frac{4J}{T}} = 6 + 4e^{\frac{2J}{T}} + 4e^{-\frac{2J}{T}}. \tag{15}$$

Решение этого уравнения дает критическую температуру $1.20273J$.

Рассмотрим также модель на треугольной решетке с изинговским слагаемым

$$H = -J_2 \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - J_3 \sum_{i,j,k} \sigma_i \sigma_j \sigma_k. \tag{16}$$

В данном случае имеем те же конфигурации, что и в модели Изинга на треугольной решетке, рассмотренной ранее. Уравнение для равенства статистических сумм упорядоченных и неупорядоченных конфигураций показывает, что критическое поведение не зависит от параметра $\mu = J_3/J_2$.

Мы рассмотрели многоспиновые модели, в которых классические спины принимают значения 1. В то же время можно рассмотреть модели со спином 1 и больше. В таких моделях более сложная фазовая структура. Например, трехкритическая модель Изинга, где классические спины принимают значения -1, 0, 1, имеет гамильтониан

$$H = -J_2 \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i^2. \tag{17}$$

Здесь есть точка, в которой фазовый переход второго рода переходит в фазовый переход первого рода. Интересно, что модель в этой трикритической точке становится конформной. Она является унитарной минимальной моделью $M(4,5)$ с центральным зарядом $c = 7/10$ [11–14]. Модель $M(4,5)$ имеет в спектре поле спина $3/2$. Это говорит о том, что эта модель обладает суперсимметрией.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе обсуждается способ вычисления критической температуры для решеточных моделей, использующий разбиение конфигураций на упорядоченные и неупорядоченные. В точке фазового перехода статистические суммы для этих конфигураций равны. Для квадратной и треугольной решеток в модели Изинга данный простой приближенный способ вычисления критической температуры приводил к точным ответам. Для более сложных моделей уже этот метод работает приближенно. Достоинством этого метода является то, что им можно исследовать и трехмерные решеточные модели. Правда, не всегда этот метод может быть применен. Мы видели это на примере двумерной модели Бакстера–Ву. Кроме критической температуры, существуют критические индексы, в которых содержится важная информация о фазовом переходе. Наивные рассуждения, опирающиеся на метод, рассмотренный в статье, не позволяют их вычислить. Возможно, что данный способ можно модифицировать некоторым образом, чтобы получить оценки значений критических индексов.

В настоящей работе проведено обсуждение способа вычисления критической температуры в различных решеточных моделях, использующий одну ячейку решетки. В [18–20] были вычислены температуры фазового перехода для двумерной модели Изинга на квадратной решетке и для трехмерной модели на кубической решетке. Для остальных моделей и решеток, рассмотренных в данной статье, критические температуры выведены впервые автором.

[1] *Вильсон К., Когут Дж.* Ренормализационная группа и ϵ-разложение / Пер с англ. М.: Мир, 1975.
[2] *Покровский А.З, Паташинский В.Л.* Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982.
[3] *Pelissetto A, Vicari E.* // Phys.Rept. 2002. **368**. P. 549.
[4] *Васильев А.Н.* Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. ПИЯФ РАН, 1998.
[5] *Лебедев В.В.* Флуктуационные эффекты в макрофизике. М.: МЦНМО, 2004.
[6] *Zinn-Justin J.* Quantum Field Theory and Critical Phenomena. Oxford University Press, 2021.
[7] *Пескин М., Шредер Д.* Введение в квантовую теорию поля. Пер с англ. Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, 2001.
[8] *Бакстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике. Пер с англ. М.: Мир, 1985.
[9] *Сато М., Дзимбо М., Мива Т.* // Голономные квантовые поля. Пер с англ. М.: Мир, 1983.
[10] *Поляков А.М.* Калибровочные поля и струны. Пер с англ. Ижевск: Удмуртский университет, 1999.
[11] *Belavin A.A., Polyakov A.M., Zamolodchikov A.B.* // Nucl. Phys. B. 1984. **241**. P. 333.
[12] *Замолодчиков А.Б., Замолодчиков Ал.Б.* Конформная теория поля и критические явления в двумерных системах. М.: МЦНМО, 2009.
[13] *Di Francesco Ph., Mathieu P., Senechal D.* // Conformal Field Theory. NY: Springer, 1997.
[14] *Henkel M.* Conformal Invariance and Critical Phenomena. Springer, 1999.
[15] *Blumenhagen R., Lust D., Theisen S.* Basic Concepts of String Theory. Springer, 2014.
[16] *El-Showk S., Paulos M. F., Poland D., Rychkov S., Simmons-Duffin D., Vichi A.* // Phys. Rev. D. 2012. **86**. 025022.
[17] *El-Showk S., Paulos M. F., Poland D., Rychkov S., Simmons-Duffin D., Vichi A.* // J. Stat. Phys. 2014. **157**. P. 869.
[18] *Svrakic. N.M.* // Phys. Lett. A. 1980. **80**. P. 43.
[19] *Гиттерман М., Хэлперн В.* Фазовые превращения. Краткое изложение и современные приложения. Пер с англ. М.–Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, Институт компьютерных исследований, 2006.
[20] *Liu B., Gitterman M.* // Am. J. Phys. 2003. **71**. P. 806.
[21] *Potts R.B.* // Proc. Cambridge Phil. Soc. 1952. **48**. P. 106.
[22] *Wu F.Y.* // Rev.Mod.Phys. 1982. **54**. P. 235.
[23] *Aharony A., Stauffer D.* Introduction To Percolation Theory. Taylor & Francis, 1994.
[24] *Тарасевич Ю.Ю.* Перколяция: Теория, приложения, алгоритмы. М.: Либроком, 2012.
[25] *Barber M.N.* // Phys. Rep. 1980. **59**. P. 374.
[26] *Baxter R.J., Wu F.Y.* // Phys. Rev. Lett. 1973. **31**. P. 1294.

Phase Transition Temperature in Some Lattice Models

A. O. Shishanin

Department of Higher Mathematics, Moscow Power Engineering Institute, Moscow 111250, Russia
E-mail: guaicura@gmail.com

A method for calculating the phase transition temperature using only one cell is considered. This method has been verified for various models: the two-dimensional Ising model on triangular, hexagonal, and tetrahedral lattices, and the three-position Potts model on a square lattice. The Ising model for a triangular lattice yields an exact answer. As well, this method has been used to analyze some multi-spin models.

PACS: 64.60.-A. *Keywords*: Ising model, Potts model, many-spin model, critical temperature, critical exponents, conformal field theory.
Received 02 June 2022.
English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2023. **78**, No. 2. Pp. 131–134.

Сведения об авторах

Шишанин Андрей Олегович — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 362-71-31, e-mail: guaicura@gmail.com.