Дальневосточный математический журнал. 2019. Т. 19. № 2. С. 245–255

УДК 51-73+536.758
MSC2010 70F10

© Ю. Н. Харченко[1]

Решение одномерных моделей решеточного газа

В настоящей работе показано, что термодинамический предел статистической суммы рассматриваемых статистических моделей на одномерной решётке с произвольным конечным числом взаимодействующих соседей выражается через главное собственное значение матрицы конечного размера. Высокая разреженность таких матриц для любого числа взаимодействий позволяет производить эффективный численный анализ макрохарактеристик моделей.

Ключевые слова: *модель Изинга, трансфер-матрица, статистическая сумма, свободная энергия, сингулярные кривые, фазовые переходы.*

Введение

Под решёточным газом здесь понимается множество атомов, которые могут располагаться только в узлах регулярной решётки. При построении модели решёточного газа используется большой канонический ансамбль, в статистической сумме которого производится суммирование по всем наборам атомов, которые можно разместить в узлах решётки при условии, что любой узел может быть занят не более чем одним атомом. Эта модель допускает представление в виде модели Изинга [1, 2], в которой одному направлению спина сопоставляется занятый атомом узел, а другому направлению — пустой узел и тогда суммирование по наборам атомов заменяется суммированием по наборам состояний спинов. После преобразования параметров исходной модели получаются модели, одномерные варианты которых будут рассмотрены ниже.

Вообще говоря, одномерные модели не привлекают большого внимания, поскольку в них отсутствуют фазовые переходы [2, 3]. Но результаты исследований систем [4,5], которые приближённо можно считать состоящими из одномерных цепочек атомов, дают основание полагать что даже небольшое взаимодействие этих цепочек между собой может привести к появлению фаз и, как следствие, к появлению сингулярности в свободной энергии такой системы. Однако введение такого взаимодействия уже делает модель многомерной, со всеми известными в этом случае [2, 6, 7]

[1] Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7. Электронная почта: har@iam.dvo.ru

сложностями теоретического анализа. Только в некоторых случаях удаётся получить точное решение модели, поэтому важное значение приобретают численные методы [8,9]. Недостаток численных методов решения многочастичных задач состоит в невозможности, в общем случае, проводить вычисления для большого числа частиц. Это приводит к неопределённости вопроса о близости данных вычислений величин к термодинамическому пределу данных величин. Полученное здесь решение задачи вычисления свободной энергии для трансляционно инвариантных статистических моделей с бинарным взаимодействием спинов (моделей Изинга), с произвольным конечным числом спинов взаимодействующих с каждым спином, может прояснить некоторые аспекты этих проблем. В этом решении свободная энергия модели спинов (расположенных в узлах одномерной решётки) в термодинамическом пределе выражается через главное собственное значение матрицы конечной размерности, которая определяется радиусом взаимодействия между спинами. Таким образом задача вычисления термодинамических величин данных моделей сводится к вычислению главного собственного значения соответствующей матрицы. Для небольшого размера матрицы это не вызывает проблем. При больших размерах произвести вычисления позволяет метод степенных итераций матрицы, в котором эффективно используется специфическая форма этих матриц [9].

1. Статистическая сумма

Пусть $\sigma_n^m,\ m=1,...,M,\ n=1,...,N+M$ — бинарные переменные (спины), которые принимают два значения ± 1, а $M, N, M<N$ — некоторые натуральные числа. Рассмотрим статистическую модель на одномерной решётке с узлами, пронумерованными натуральными числами $1,...,N+M$, статистическая сумма которой имеет вид

$$Z_N^{(1)}(M) = Z_N^{(1)}(M,\{K_i\},H) = \sum_{\sigma^1} \prod_{j\,=\,1}^{N} \exp\Big(\sum_{i\,=\,1}^{M} K_i \sigma_j^1 \sigma_{j+i}^1 + H\sigma_j^1\Big). \qquad (1)$$

Здесь суммирование по $\sigma^1=(\sigma_1^1,\sigma_2^1,\ldots,\sigma_N^1)$ означает суммирование по всем состояниям спинов, $K_i,\ i=1,\ldots,M,$ — некоторые вещественные параметры межспинового взаимодействия, H — параметр взаимодействия с внешним полем, и выполняется краевое условие $\sigma_{N+j}^1=\sigma_j^1\ \ j=1,\ldots,M$. Нас будет интересовать свободная энергия $F^{(1)}(M)$, которая для конкретного значения M вычисляется по формуле

$$F^{(1)}(M) = F^{(1)}(M,\{K_i\},H) = \lim_{N\to\infty} \frac{\ln Z_N^{(1)}(M,\{K_i\},H)}{N}. \qquad (2)$$

При $M=1$ формула (1) даёт статистическую сумму одномерной модели Изинга со взаимодействием между ближайшими спинами, которая имеет точное решение. Свободная энергия этой модели вычисляется через главное собственное значение (ГСЗ) — (положительное, однократное и максимальное по модулю собственное значение) матрицы размером 2×2 [6,7] (решение Изинга). Мы покажем, что свободная энергия модели с произвольным значением M вычисляется через ГСЗ некоторой матрицы размером $2^M \times 2^M$ (это собственное значение для конечных значений M существует по теореме Перрона–Фробениуса). Будем называть такие модели одномерными моделями Изинга.

Пусть $\mu_n = (\sigma_n^1, \sigma_n^2, \ldots, \sigma_n^M)$ — наборы бинарных переменных. Будем полагать, что множество этих наборов упорядочено. Тогда след N-ой степени матрицы $A(M)$, элементы которой имеют вид $\mathrm{g}(\mu_j, \mu_{j+1})$, равен

$$tr(A^N(M)) = \sum_{\mu_1}\sum_{\mu_2}\cdots\sum_{\mu_N}\prod_{j\,=\,1}^{N}\mathrm{g}(\mu_j, \mu_{j+1}). \tag{3}$$

Положим теперь, что элементы $\mathrm{g}(\mu_j, \mu_{j+1})$ удовлетворяют равенствам

$$\mathrm{g}(\mu_j, \mu_{j+1}) = \exp(\sum_{i\,=\,1}^{M} K_i\sigma_j^1\sigma_{j+1}^i + H\sigma_j^1)\delta(\sigma_j^2, \sigma_{j+1}^1)\ldots\delta(\sigma_j^M, \sigma_{j+1}^{M-1}), \tag{4}$$

где $\delta(\sigma_j^i, \sigma_{j+1}^{i-1})$ — символы Кронекера, $\delta(x,y) = 0, x \neq y, \delta(x,y) = 1, x = y$, а x, y — целые числа. Для этого случая вычислим сумму с правой стороны равества (3)

$$\sum_{\mu_1}\sum_{\mu_2}\cdots\sum_{\mu_N}\prod_{j\,=\,1}^{N}\mathrm{g}(\mu_j, \mu_{j+1}) =$$
$$= \sum_{\sigma^1}\sum_{\sigma^2}\cdots\sum_{\sigma^M}\prod_{j\,=\,1}^{N}\exp\left(\sum_{i\,=\,1}^{M} K_i\sigma_j^1\sigma_{j+1}^i + H\sigma_j^1\right)\delta(\sigma_j^2, \sigma_{j+1}^1)\cdot\ldots\cdot\delta(\sigma_j^M, \sigma_{j+1}^{M-1}) =$$
$$= \sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^{M-1}}\prod_{j\,=\,1}^{N}\exp\left(\sum_{i\,=\,1}^{M-1} K_i\sigma_j^1\sigma_{j+1}^i + K_M\sigma_j^1\sigma_{j+2}^{M-1} + H\sigma_j^1\right)\delta\left(\sigma_j^2, \sigma_{j+1}^1\right)\cdot\ldots\cdot\delta\left(\sigma_j^{M-1}; \sigma_{j+1}^{M-2}\right) =$$
$$= \sum_{\sigma^1,\ldots,\sigma^{M-2}}\prod_{j\,=\,1}^{N}\exp\left(\sum_{i\,=\,1}^{M-2} K_i\sigma_j^1\sigma_{j+1}^i + K_{M-1}\sigma_j^1\sigma_{j+2}^{M-2} + K_M\sigma_j^1\sigma_{j+3}^{M-2} + H\sigma_j^1\right)$$
$$\delta(\sigma_j^2, \sigma_{j+1}^1)\cdot\ldots\cdot\delta(\sigma_j^{M-2}, \sigma_{j+1}^{M-3}) = \ldots = Z_N^{(1)}(M).$$

Отсюда получим равенство, которое выполняется при условии (4)

$$Z_N^{(1)}(M) = tr(A^N(M)). \tag{5}$$

Преобразование подобия не меняет следа матрицы и любую матрицу преобразованием подобия можно привести к треугольному виду [10]. Поэтому статистическая сумма равна сумме N-х степеней всех собственных значений матрицы $A(M)$. Матрица $A(M)$ называется трансфер-матрицей, свободная энергия $F^{(1)}(M)$ (2) выражается через ГСЗ $\lambda(A(M))$ трансфер-матрицы $A(M)$ формулой [2, 9]

$$F^{(1)}(M) = \ln(\lambda(A(M))).$$

Далее будет дано выражение трансфер-матрицы $A(M)$ в форме удобной для приложений. Для этого изложим некоторые сведения из теории индексированных матриц.

2. Индексированные матрицы

Теория индексированных матриц для решёточных моделей представлена в монографии [9]. Определим одноиндексные матрицы, операторы перестановок индексов и формулы, которые понадобятся в дальнейшем.

Оператором перестановок индексов будем называть оператор переставляющий векторы канонического базиса евклидова пространства $\mathbb{R}^{2^J}$ $\delta^j = [\delta(j,1),\dots,\delta(j,2^J)]^{\mathsf{T}}$ (здесь J — некоторое натуральное число и T — знак транспонирования) в следующем порядке:

$$\delta^j \to \delta^{2j-1} \quad \text{и} \quad \delta^{2^{J-1}+j} \to \delta^{2j}, \quad j = 1, \dots, 2^{J-1}.$$

Его матрицу размером $2^J \times 2^J$ в этом базисе будем обозначать символом P_J.

Пусть q — числовая матрица размером 2×2, тогда через $q_{[1]}$ будем обозначать блочно-диагональную матрицу размером $2^J \times 2^J$, блоками которой служит матрица q. Индексированную матрицу $q_{[j]}$ определим формулой $q_{[j]} = P_J^j q_{[1]} P_J^{-j}$. Матрица $q_{[j]}$ — это блочно-диагональная матрица. Её блоками служат матрицы, получающиеся, если на место каждого элемента матрицы q подставить единичные матрицы размером $2^{(j-1)} \times 2^{(j-1)}$, умноженные на значение этого элемента.

Для конкретных матриц размером $2{\times}2$ будем применять обозначение $\{(*,*),(*,*)\}$, где в круглых скобках будем записывать элементы строк.

Из блочной структуры индексированных матриц следует, что матрицы q и w с разными индексами коммутируют

$$q_{[i]} w_{[j]} = w_{[j]} q_{[i]}, i \neq j, \tag{6}$$

а из определения индексированных матриц следует равенство

$$q_{[i]} w_{[i]} = (qw)_{[i]}. \tag{7}$$

Введём обозначения для базисных матриц размером 2×2:

$$e = e(+1,+1) = \{(1,0),(0,0)\}, \qquad f = e(+1,-1) = \{(0,1),(0,0)\},$$

$$\mathrm{g} = e(-1,+1) = \{(0,0),(1,0)\}, \qquad h = e(-1,-1) = \{(0,0),(0,1)\}. \tag{8}$$

Тогда любая матрица B размером $2^J \times 2^J$ может быть записана в виде

$$B = \sum_{\sigma^1,\sigma^2} \beta(\sigma^1,\sigma^2) \prod_{j=1}^{J} e(\sigma^1_j,\sigma^2_j)_{[j]} \equiv B_{[J,\dots,1]}, \tag{9}$$

где $\beta(\sigma^1,\sigma^2)$ — числовые коэффициенты и выполняются равенства

$$e(\sigma^1_j,\sigma^2_j)_{[j]} e(\sigma^3_j,\sigma^4_j)_{[j]} = \delta(\sigma^2_j,\sigma^3_j) e(\sigma^1_j,\sigma^4_j)_{[j]}, j = 1,\dots,J. \tag{10}$$

След матрицы B вычисляется так:

$$tr(B) = \sum_{\sigma^1,\sigma^2} \beta\left(\sigma^1,\sigma^2\right) tr\left(\prod_{j=1}^{J} e(\sigma^1_j,\sigma^2_j)_{[j]}\right) = \tag{11}$$

$$= \sum_{\sigma^1,\sigma^2} \beta\left(\sigma^1,\sigma^2\right) \prod_{j=1}^{J} \delta(\sigma^1_j,\sigma^2_j) = \sum_{\sigma^1} \beta(\sigma^1,\sigma^1).$$

Кроме оператора P_J, введём ещё перестановочные операторы, матрицы которых $P_{[i,j]}$ имеют вид

$$P_{[i,j]} = e_{[i]}e_{[j]} + f_{[i]}\mathrm{g}_{[j]} + \mathrm{g}_{[i]}f_{[j]} + h_{[i]}h_{[j]}, i \neq j.$$

Они обладают свойствами

$$q_{[i]}P_{[i,j]} = P_{[i,j]}q_{[j]}, \quad P_{[i,j]}P_{[i,m]} = P_{[j,m]}P_{[i,j]}, \quad P_J = P_{[J,1]}P_{[J-1,1]}\dots P_{[2,1]}, \tag{12}$$

в частности, выполняются равенства

$$P_{[J,j]}P_{[J,m]} = P_{[j,m]}P_{[J,j]}, q_{[j]}P_{[J,j]} = P_{[J,j]}q_{[J]} \tag{13}$$

Заметим, что из формулы (9) следует, что матрицу B можно записать в виде

$$B = e_{[J]}C_{[J-1,\dots,1]} + f_{[J]}D_{[J-1,\dots,1]} + \mathrm{g}_{[J]}E_{[J-1,\dots,1]} + h_{[J]}F_{[J-1,\dots,1]},$$

где все индексированные матрицы имеют размер $2^J \times 2^J$. Но, исходя из блочной структуры индексированных матриц, матрице B можно придать вид

$$B = \{(C_{[J-1,\dots,1]}, D_{[J-1,\dots,1]}), (E_{[J-1,\dots,1]}, F_{[J-1,\dots,1]})\},$$

где элементы матрицы размером 2×2 следует понимать как матрицы размером $2^{(J-1)} \times 2^{(J-1)}$. Так, полезные для наших дальнейших вычислений равенства (13) в этих обозначениях примут вид

$$\{(e_{[j]}, \mathrm{g}_{[j]}), (f_{[j]}, h_{[j]})\}\{(e_{[m]}, \mathrm{g}_{[m]}), (f_{[m]}, h_{[m]})\} = P_{[j,m]}\{(e_{[j]}, \mathrm{g}_{[j]}), (f_{[j]}, h_{[j]})\}, \tag{14}$$
$$q_{[j]}\{(e_{[j]}, \mathrm{g}_{[j]}), (f_{[j]}, h_{[j]})\} = \{(e_{[j]}, \mathrm{g}_{[j]}), (f_{[j]}, h_{[j]})\}q,$$

где все индексированные матрицы имеют размер $2^{(J-1)} \times 2^{(J-1)}$.

3. Трансфер-матрица

Для заданного значения M конкретная форма трансфер — матрицы $A(M)$ определяется соответствием между наборами бинарных переменных и натуральными числами, которыми нумеруются элементы матрицы. Рассмотрим матрицу, которая определяется формулой

$$A(M) = \sum_{\mu_1}\sum_{\mu_2} \mathrm{g}(\mu_1, \mu_2) e(\sigma_1^1, \sigma_2^1)_{[1]} e(\sigma_1^2, \sigma_2^2)_{[2]} \dots e(\sigma_1^M, \sigma_2^M)_{[M]}, \tag{15}$$

где величина $\mathrm{g}(\mu_1,\mu_2)$ согласно (4) имеет вид

$$\mathrm{g}(\mu_1, \mu_2) = \exp(\sum_{i=1}^{M} K_i\sigma_1^1\sigma_2^i + H\sigma_1^1)\delta(\sigma_1^2, \sigma_2^1)\dots\delta(\sigma_1^M, \sigma_2^{M-1}),$$

и все индексированные матрицы имеют размер $2^M \times 2^M$. Покажем, что эта матрица является трансфер-матрицей модели (1). Для этого вычислим статистическую сумму по формуле (5). В этих вычислениях будем использовать наборы бинарных переменных $\nu_n = (\nu_n^1, \nu_n^2, \dots, \nu_n^M)$, аналогичные μ_n. Сначала вычислим $A^2(M)$, для этого запишем $A^2(M)$ в виде

$$A^2(M) = \sum_{\mu_1,\mu_2,\mu_3,\nu_1} \mathrm{g}(\mu_1,\mu_2) e(\sigma_1^1,\sigma_2^1)_{[1]} \dots e(\sigma_1^M,\sigma_2^M)_{[M]} \mathrm{g}(\nu_1,\mu_3) e(\nu_1^1,\sigma_3^1)_{[1]} \dots e(\nu_1^M,\sigma_3^M)_{[M]}.$$

С учётом перестановочных соотношений (6) и равенств (10) это произведение запишем в виде

$$A^2(M) = \sum_{\mu_1,\mu_2,\mu_3,\nu_1} \mathrm{g}(\mu_1,\mu_2)\mathrm{g}(\nu_1,\mu_3)\delta(\sigma_2^1,\nu_1^1)e(\sigma_1^1,\sigma_3^1)_{[1]} \dots \delta(\sigma_2^M,\nu_1^M)e(\sigma_1^M,\sigma_3^M)_{[M]} =$$
$$= \sum_{\mu_1,\mu_2,\mu_3} \mathrm{g}(\mu_1,\mu_2)\mathrm{g}(\mu_2,\mu_3)e(\sigma_1^1,\sigma_3^1)_{[1]} \dots e(\sigma_1^M,\sigma_3^M)_{[M]}.$$

Продолжив процесс умножения на $A(M)$, получим

$$A^{(N-1)}(M) = \sum_{\mu_1,\dots,\mu_N} \prod_{j\,=\,1}^{(N-1)} \mathrm{g}(\mu_j,\mu_{(j+1)}) e(\sigma_1^1,\sigma_N^1)_{[1]} \dots e(\sigma_1^M,\sigma_N^M)_{[M]}.$$

Это выражение для $A^{(N-1)}(M)$ умножим на матрицу $A(M)$, которую запишем, используя наборы бинарных переменных ν_1 и ν_2:

$$A(M) = \sum_{\nu_2}\sum_{\nu_1} \mathrm{g}(\nu_2,\nu_1) e(\nu_2^1,\nu_1^1)_{[1]} e(\nu_2^2,\nu_1^2)_{[2]} \dots e(\nu_2^M,\nu_1^M)_{[M]}.$$

В результате получим выражение для $A^N(M)$

$$A^N(M) = \sum_{\mu_1,\dots,\mu_N,\nu_1} \prod_{j\,=\,1}^{N-1} \mathrm{g}(\mu_j,\mu_{(j+1)}) e_{[1]} \mathrm{g}(\mu_N,\nu_1) e(\sigma_1^1,\nu_1)_{[1]} \dots e(\sigma_1^M,\nu_1^M))_{[M]}.$$

Вычислив след правой части этого равенства по формуле (11), получим статистическую сумму (1) в форме (5).

Теперь вычислим трансфер-матрицу $A(M)$ (15). Сумму по всем значениям набора μ_1 трансфер-матрицы (15) запишем в виде $A(M) = Q + W$, где

$$Q = \exp(H) \sum_{\mu_2} e(1,\sigma_2^1)_{[1]} \exp(K_1\sigma_2^1) \prod_{i\,=\,1}^{M-1} e(\sigma_2^i,\sigma_2^{i+1})_{[i+1]} \exp(K_{i+1}\sigma_2^{i+1}),$$

$$W = \exp(-\,H) \sum_{\mu_2} e(1,\sigma_2^1)_{[1]} \exp(-\,K_1\sigma_2^1) \prod_{i\,=\,1}^{M-1} e(\sigma_2^i,\sigma_2^{i+1})_{[i+1]} \exp(-\,K_{1+1}\sigma_2^{i+1}).$$

Выражение для Q может быть представлено в виде произведения матриц размером 2×2 с элементами из индексированных матриц. Распишем его более подробно

$$Q = \exp(H) \sum_{\sigma_2^1} e(1,\sigma_2^1)_{[1]} \exp(K_1\sigma_2^1) \sum_{\sigma_2^2} e(1,\sigma_2^1)_{[2]} \exp(K_2\sigma_2^2) \dots$$
$$\sum_{\sigma_2^{M-1}} e(\sigma_2^{M-2},\sigma_2^{M-1})_{[M-1]} \exp(K_{M-1}\sigma_2^{M-1}) \sum_{\sigma_2^M} e(\sigma_2^{M-1},\sigma_2^M)_{[M]} \exp(K_M\sigma_2^M).$$

Введём теперь следующие величины

$$S^i = \{(e_{[i]} \exp(K_i), f_{[i]} \exp(-\, K_i)), (\mathrm{g}_{[i]} \exp(K_i), h_{[i]} \exp(-\, K_i))\}$$

и обозначим символами u и v векторы $u=(1{,}0)$, $v=(0{,}1)$. Тогда Q примет вид

$$Q = \exp(H) u \prod_{i\,=\,1}^{M} S^i (u^T + v^T).$$

Осуществим транспонирование этого полинома от индексированных матриц. Для этого транспонируем индексированные матрицы без изменения их прежних мест в полиноме. Это возможно ввиду коммутации данных матриц (6). Тогда получим выражение для Q^T

$$Q^T = \exp(H) u \prod_{i\,=\,1}^{M} r_i(K_i) \{(e_{[i]}, \mathrm{g}_{[i]}), (f_{[i]}, h_{[i]})\} (u^T + v^T),$$

где символом $r(K_i)$ обозначена матрица, которая имеет вид

$$r(K_i) = \{(\exp(K_i), 0), (0, \exp(-\, K_i))\}.$$

Используя перестановочные соотношения (14), запишем выражение для Q^T в виде

$$Q^T = \exp(H) \prod_{i\,=\,1}^{M} r_{[i]}(K_i) \prod_{i\,=\,1}^{M-1} P_{[i+1,1]} u \{(e_{[1]}, \mathrm{g}_{[1]}), (f_{[1]}, h_{[1]})\} (u^T + v^T) =$$

$$= \exp(H) \prod_{i\,=\,1}^{M} r_{[i]}(K_i) \prod_{i\,=\,1}^{M-1} P_{[i+1,1]} (e_{[1]} + \mathrm{g}_{[1]}).$$

Введём новые обозначения

$$t(K_i) = \{(\exp(-\, K_i), 0), (0, \exp(K_i))\}, \qquad c(H) = \{(\exp(H), 0), (0, \exp(-\, H))\},$$
$$b_{[i,1]}(K_i) = e_{[1]} r_{[i]}(K_i) + h_{[1]} t_{[i]}(K_i)$$

и, используя коммутационные соотношения и формулы (6), (7), (12), получим

$$Q^T = P_M^{-1} r_{[1]}(K_M)(e_{[1]} + \mathrm{g}_{[1]}) c_{[1]}(H) \prod_{i\,=\,1}^{M-1} b_{[i+1,1]}(K_i).$$

Таким же способом получим выражение для W^T

$$W^T = P_M^{-1} t_{[1]}(K_M)(f_{[1]} + h_{[1]}) c_{[1]}(H) \prod_{i\,=\,1}^{M-1} b_{[i+1,1]}(K_i).$$

Тогда для $A^T(M) = Q^T + W^T$ получим формулу

$$A^T(M) = P_M^{-1} a_{[1]}(K_M) c_{[1]}(H) \prod_{i\,=\,1}^{M-1} b_{[i+1,1]}(K_i),$$

где матрица $a(K_M)$ имеет вид

$$a(K_M) = \{(\exp(K_M), \exp(-\,K_M)), (\exp(-\,K_M), \exp(K_M))\}.$$

Отсюда получим искомое выражение для трансфер-матрицы $A(M)$ одномерной модели Изинга (1)

$$A(M) = \prod_{i\,=\,1}^{M-1} b_{[i+1,1]}(K_i)\; c_{[1]}(H)\; a_{[1]}(K_M)\; P_M. \tag{16}$$

4. Некоторые вопросы численного анализа моделей

Полученная трансфер-матрица имеет структуру, которая позволяет весьма эффективно использовать известный метод степенных итераций матрицы для вычисления её ГСЗ. Эффективность этого метода обусловлена чрезвычайной разреженностью трансфер-матрицы и существованием ГСЗ. Для любого M матрица оператора перестановки индексов имеет только один ненулевой элемент, равный единице в каждой строке и каждом столбце, а матрица, стоящая перед матрицей оператора перестановки индексов, является блочно-диагональной с блоками размером 2×2. С другой стороны, М-я степень трансфер-матрицы является матрицей с положительными элементами, и поэтому, для неё выполняется теорема Перрона – Фробениуса [10], согласно которой ГСЗ матрицы существует и аналитично зависит от параметров матрицы $A(M)$. Существование ГСЗ критично для применения метода, а разреженность трансфер-матрицы позволяет построить экономный быстродействующий алгоритм для вычисления ГСЗ [9].

Такого вида матрицы были использованы для вычисления макрохарактеристик двумерных моделей типа Изинга с взаимодействием между ближайшими соседями [9, 11], где эти матрицы назывались корневыми трансфер-матрицами (КТМ). Свободная энергия $F^{(2)}$ этих двумерных моделей с КТМ $A^{(2)}(M)$ определялась формулой

$$F^{(2)} = \lim_{M\to\infty} \lambda(A^{(2)}(M)),$$

где $\lambda(A^{(2)}(M))$ — это ГСЗ матрицы $A^{(2)}(M)$.

Существуют по крайней мере три случая, в которых трансфер-матрица (16) по форме в точности совпадает с КТМ соответствующих многомерных моделей со взаимодействием между ближайшими соседями. Отличие состоит в том, что в одномерных моделях параметр M определяет в некотором смысле расстояние между взаимодействующими спинами, а параметр M в многомерных моделях равен числу узлов двумерной решётки по горизонтали, в то время как число узлов по вертикали является бесконечным. Рассмотрим эти случаи.

1) Выберем для параметров K_i в трансфер-матрице (16) значения $K_2 = \ldots = K_{M-1} = 0, K_1 = K, K_M = L$. При этом трансфер-матрица $A(M)$ модели примет вид

$$A(M) = b_{[2,1]}(K)\; c_{[1]}(H)\; a_{[1]}(L)\; P_M.$$

Эта трансфер-матрица с точностью до обозначений совпадает с КТМ двумерной модели Изинга на квадратной решётке со взаимодействием между ближайшими соседями [9, с. 128].

2) Пусть параметры K_i принимают значения $K_2 = \ldots = 0, K_{M-1} = J, K_1 = K$, $K_M = L$. Тогда трансфер-матрица $B(M)$ модели примет вид

$$B(M) = b_{[M,1]}(J)\; b_{[2,1]}(K)\; c_{[1]}(H)\; a_{[1]}(L)\; P_M,$$

и она с точностью до преобразования подобия совпадает с КТМ двумерной модели Изинга на треугольной решётке [9].

3) Для параметров K_i, которые принимают значения $K_2 = \ldots = 0, K_{R-1} = 0$, $K_R = J, K_{R+1} = 0, K_{M-1} = 0, K_1 = K, K_M = L$, трансфер-матрица $C(M)$ одномерной модели примет вид

$$C(M) = b_{[R+1,1]}(U)\; b_{[2,1]}(K)\; c_{[1]}(H)\; a_{[1]}(L)\; P_M.$$

Эта трансфер-матрица при $M = RN$ совпадает с КТМ трёхмерной модели Изинга на кубической решётке со взаимодействием между ближайшими соседями [9, с. 147].

Ни для одной из этих моделей не существует аналитического решения при H не равном нулю. Что обращает внимание на использование возможностей численного анализа для одномерных моделей Изинга. Такие связи между одномерными и многомерными моделями могут быть использованы для решения проблем в исследованиях разнообразных моделей [12–14] методом численного анализа. В итерационном методе на скорость сходимости к пределу существенным образом влияет величина отношения ГСЗ к другому бліжайшему по абсолютной величине собственному значению этой трансфер-матрицы. Было замечено [9], что это отношение достигает своего минимального значения вблизи точек, которые в пределе, при M стремящемся к бесконечности, стремятся к сингулярным точкам модели. Таким образом, изучение одномерных моделей может дать представление о картине расположения сингулярных линий в соответствующих многомерных моделях. Стоить отметить, что изучение одномерных моделей интересно и само по себе, а поскольку их свободная энергия определяется ГСЗ матрицы конечного размера, их термодинамические свойства в принципе могут быть исследованы численными методами с требуемой точностью.

Заключение

В работе было получено точное решение проблемы вычисления свободной энергии (2) одномерной статистической модели взаимодействующих спинов, в которой каждый спин взаимодействует с $2M$ ближайшими соседями (1). Проблема сведена к вычислению ГСЗ матрицы размером $2^M \times 2^M$ (16). В общем случае это ГСЗ не может быть вычислено точно, но специфическая форма матрицы позволяет использовать эффективный алгоритм для его численного вычисления. Кроме того форма матрицы позволила установить связь некоторых одномерных моделей Изинга с многомерными моделями Изинга со взаимодействием между ближайшими соседями. Это позволяет использовать уже известные свойства многомерных моделей для прогнозирования свойств систем, состоящих из длинных цепочек атомов.

Список литературы

[1] T. D. Lee, C. N. Yang, "Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. Theory of condensation", *Phys. Rev.*, **87**, (1952), 404–410.

[2] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, New York and London, 1982.

[3] E. H. Lieb, D. C. Mfttis, *Mathematical Physics in One Dimension*, Academic Press, New York and London, 1966.

[4] P. Cambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. Malagoli, W. Eberhard, K. Karn, and C. Carbone, "Ferromagnetism in one-dimensional monatomic metal chains", *Nature*, **416**:6878, (2002), 301–304.

[5] P. D. Andriushchenko and K. V. Nefedev, "Magnetic phase transition in the lattice Ising model", *Advanced Material Research*, **718**, (2013), 166–171.

[6] R. Huang, "Ising spins on randomly multy-branched Hustmi square lattice: Thermodynamics and phase transition in cross-dimensional range", *Physics Letters*, **A 380**, (2016), 3333–3339.

[7] S. Shabnam, S. DasGupta, S. K. Roy, "Existence of a line of critical points in a two-dimensional Lebwohl Lasher model", *Physics Letters*, **A 380**, (2016), 667–671.

[8] F. Wang and D. P. Landau, "Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States", *Physics Letters*, **86**:2050, (2001).

[9] А. А. Дмитриев, В. В. Катрахов, Ю. Н. Харченко, *Корневые трансфер-матрицы в моделях Изинга.*, Наука, М., 2004.

[10] Р. Хорн, Ч. Джонсон, *Матричный анализ*, Мир, М., 1989.

[11] V. V. Katrakhov, Yu. N. Kharchenko, "Two-dimensional four-line models of the Ising model type", *Theoretical and Mathematical Physics*, **149**:2, (2006), 1545–1558.

[12] U. B. Arnalds, J. Cyico, Y. Stopfel, V. Kapaklis, O. Barenbold, M. A. Verschuren, U. Volff, V. Neu, A. Bergman and B. Hjorvarsson, "A new look on the two-dimensional Ising model: thermal artificial spins", *New Journal of Physics*, **18**:2, (2016), 023008.

[13] Y. Fan, "One-dimensional Ising model with k-spin interactions", *European Journal of Physics*, **32**:6, (2011), 1643.

[14] Y. Shevchenko, A. Makarov, K. Nefedev, "Effect of long- and shot-range interactions on the thermodynamics of dipolar spin ice", *Physics Letters*, **A 381**, (2017), 428–434.

Поступила в редакцию
16 сентября 2019 г.

Kharchenko Yu. N. Solution of one-dimensional lattice gas models. *Far Eastern Mathematical Journal.* 2019. V. 19. No 2. P. 245–255.

ABSTRACT

In this paper it is shown that the thermodynamic limit of the partition function of the statistical models under consideration on a one-dimensional lattice with an arbitrary finite number of interacting neighbors is expressed in terms of the principal eigenvalue of a matrix of finite size. The high sparseness of these matrices for any number of interactions makes it possible to perform an effective numerical analysis of the macro characteristics of these models.

Key words: *Ising model, transfer matrix, statistical sum, free energy, singular curves, phase transitions.*