

КЛАСТЕРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Иванцов И.Д.

Научный руководитель д-р физ.-мат. наук Овчинников С.Г.

Сибирский Федеральный Университет

На протяжении последних двух десятилетий при исследовании решеточных моделей большое внимание уделяется кластерному подходу. В данной работе используется кластерная теория возмущений в представлении X-операторов. Данное представление позволяет непосредственно определить хаббардовскую функцию Грина в приближении Хаббард-I и вычислить спектральную функцию.

Целью данной работы является применение кластерной теории возмущений к двумерной модели Изинга, имеющей точное решение. Полученные таким образом значения критической температуры и критические индексы позволяют оценить точность метода в зависимости от размеров кластера.

Схема кластерной теории возмущений содержит два основных этапа: разбиение изначальной решетки на кластеры и построение собственных состояний для данного кластера методом точной диагонализации. В данной работе рассматривается двумерная модель Изинга на квадратной решетке, вследствие чего кластеры определяются прямоугольниками размером $m \times n$ узлов. Тогда количество возможных состояний кластера равно $2^{m \times n}$.

Гамильтониан модели Изинга:

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_i S_i^z,$$

где J_{ij} – энергия взаимодействия, h – внешнее поле, S_i^z – проекция спина. Разбив решетку на кластеры (Рисунок 1-2) и перегруппировав слагаемые так, чтобы отделить внутрикластерные и межкластерные взаимодействия, получим

$$H = \sum_i H_0(i) + \sum_{ij} H_1(i, j),$$

где $H_0(i)$ – внутрикластерная часть i -го кластера. Это слагаемое точно диагонализуется, и на базе его собственных значений строятся операторы Хаббарда. $H_1(i, j)$ – взаимодействия между кластерами i и j .

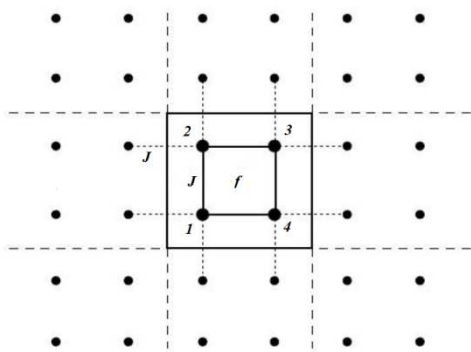


Рисунок 1. Кластер 2x2

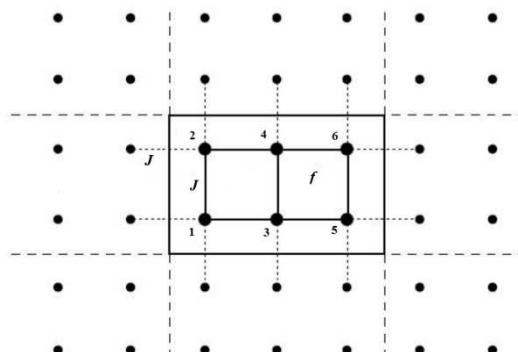


Рисунок 2. Кластер 3x2

Используемые в работе операторы Хаббарда определяются как

$$X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|.$$

Действие такого оператора задает переход системы из состояния q в состояние p , которые в общем случае задаются как:

$$|p\rangle = a_{1p} |\uparrow, \uparrow, \dots, \uparrow\rangle + a_{2p} |\downarrow, \uparrow, \dots, \uparrow\rangle + \dots + a_{np} |\downarrow, \downarrow, \dots, \downarrow\rangle.$$

В случае же модели Изинга, в следствии диагональности гамильтониана, все состояния системы разделены, то есть коэффициенты $a_{qp} = \delta_{qp}$. Таким образом имеется 2^N состояний ($N = m \times n$), каждому из которых соответствует одно состояние кластера:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |\uparrow, \uparrow, \dots, \uparrow\rangle \\ |2\rangle &= |\downarrow, \uparrow, \dots, \uparrow\rangle \end{aligned}$$

$$\vdots \vdots$$

$$|2^N\rangle = |\downarrow, \downarrow, \dots, \downarrow\rangle.$$

В представлении операторов Хаббарда новый гамильтониан имеет вид:

$$H = \sum_{f,p} \varepsilon_p X_f^{pp} + \sum_{fg} \sum_{pq} J_{fg}^{pq} X_f^{pp} X_g^{qq},$$

где ε_p - собственные значения энергии кластера, J_{fg}^{pq} - энергия взаимодействия между кластерами f и g в состояниях p и q соответственно.

Для получения намагниченности строятся двухвременные функции Грина:

$$G(t, t') = \ll A(t) | B(t') \gg = \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle,$$

где $\theta(t - t')$ - тета-функция (функция Хевисайда). Уравнение на функцию записывается как:

$$E \ll X_f^{mn} | X_g^{rs} \gg = \langle [X_f^{mn}, X_g^{rs}] \rangle + \ll [X_f^{mn}, H] | X_g^{rs} \gg.$$

Функция Грина, стоящая в правой части, более сложная и имеет вид $\ll X_f^{mn} X_h^{pq} | X_g^{rs} \gg$, и для точного решения необходимо записать такое же уравнение для этой функции, что в свою очередь приводит к бесконечной цепочке зацепляющихся уравнений.

В данной работе для расщепления цепочки используется приближение Хаббард-I, заключающееся в преобразовании функции Грина:

$$\ll X_f^{mn} X_h^{pq} | X_g^{rs} \gg = \langle X_h^{pq} \rangle \ll X_f^{mn} | X_g^{rs} \gg,$$

что позволяет замкнуть цепочку уравнений. Стоит отметить, что приближение Хаббард-I соответствует приближение среднего поля для модели Изинга. В некластерном случае полученное решение соответствует известному решению из теории Ландау.

В явном виде функция Грина, полученная из уравнения, имеет вид:

$$\ll X_f^{pq} | X_f^{qp} \gg = \frac{\langle X_f^{pp} \rangle - \langle X_f^{qq} \rangle}{E - \varepsilon - 2J \sum_n a_{pq}^n \langle X_f^{nn} \rangle},$$

где a_{pq}^n - некоторые известные коэффициенты.

Используя спектральное представление найдем числа заполнения $\langle X_f^{pp} \rangle$.

$$\langle X_f^{pq} X_f^{qp} \rangle = \langle X_f^{pp} \rangle = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{2^N} \sum_q \int \frac{1}{e^{\beta E} - 1} \left(\frac{i}{\pi} \right) \text{Im}(\ll X_f^{pq} | X_f^{qp} \gg_{E+i\delta}) dE,$$

где $\beta = \frac{1}{kT}$. Таким образом получается система из 2^N уравнений, решив которую получим числа заполнения.

Так как даже при кластере 2x2 получаются 16 уравнений, то их решение осуществляется численно, после чего, с учетом условия нормировки

$$\sum_p \langle X_f^{pp} \rangle = 1,$$

вычисляется среднее значение спина (намагниченность):

$$\langle S^z \rangle = \sum_p S_p \langle X_f^{pp} \rangle,$$

где S_p - значение проекции спина кластера в состоянии p .

Полученные в результате расчета значения намагниченности представлены на рисунке 3.

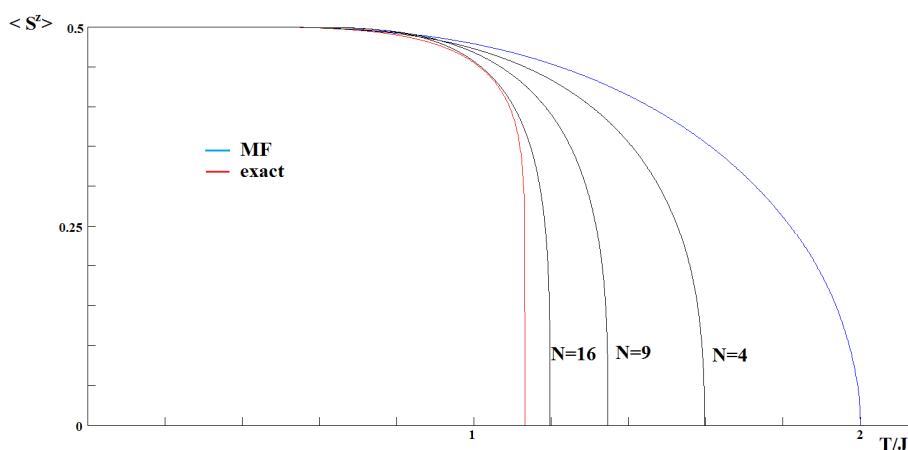


Рисунок 3. Среднее значение проекции спина $\langle S^z \rangle$ в зависимости от температуры и размера кластера. Синим цветом обозначено решение в приближении среднего поля, красным – точное решение

Полученные значения критической температуры приведены в таблице 1.

Таблица 1.

N	1 (MF)	4	6	9	12	16	20	exact
T_c	2	1.596	1.451	1.347	1.259	1.197	1.162	1.135

Полученные значения критического индекса β не зависят от размера кластера и равны $1/2$, в то время как точное решение дает индекс $\beta=1/8$. Для анализа поведения кривой намагниченности используется функция

$$f(T) = \frac{d \ln \langle S^z \rangle}{d \ln(T_c - T)}.$$

Эта функция определяет значение α , где α определяется как $\langle S^z \rangle \sim (T_c - T)^\alpha$, в области температур от T до T_c . Так же следует отметить что

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \frac{d \ln \langle S^z \rangle}{d \ln(T_c - T)} = \beta.$$

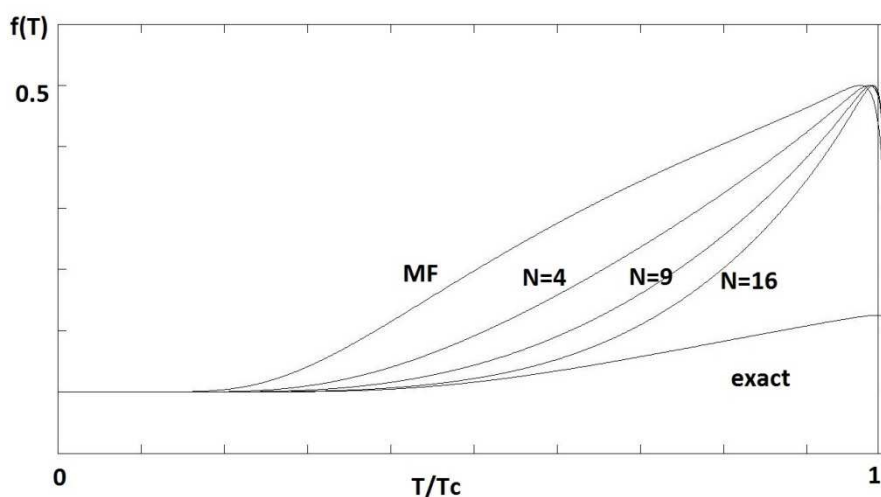


Рисунок 4. График функции $f(T)$ в зависимости от размера кластера

На графике видно, что при увеличении N кривая $f(T)$ в области температур $T < T_c$ стремится к точному решению. Аналогичное поведение наблюдается для

индексов γ и δ . Таким образом, эффективность кластерной теории возмущений пропорциональна размеру кластера.

Результаты данной работы показывают, что данный метод вполне применим к решеточным моделям и при больших значениях N результаты расчетов близки к точному решению.