Известия НАН Армении. Математика, 41, № 6, 2006, 5–10

НУЛИ ЯНГА–ЛИ И ФИШЕРА НА КОМПЛЕКСНОЙ ПЛОСКОСТИ МОДЕЛИ БЛЮМА–КАПЕЛА

Н. С. Ананикян, К. Г. Саргсян, Р. Г. Гулгазарян

Ереванский физический институт им. Алиханяна, Армения
E-mail : ghulr@yahoo.com

Резюме. Нули статистической суммы в термодинамическом пределе позволяют выявлять и описывать сингулярности термодинамических функций. В работе рассмотрены сингулярности статистической суммы в комплексной плоскости внешнего магнитного поля (нули Янга–Ли) или температуры (нули Фишера) для одномерной модели Блюме–Капела со спином 1. Получены аналитические выражения для всех трёх собственных значений трансфер-матрицы модели. Было получено распределение и плотность распределения нулей статистической суммы, исключением меньшего по модулю собственного значения. Приведены графики распределений Янга–Ли нулей для комплексной плоскости внешнего магнитного поля и фишеровских нулей для комплексной плоскости температуры. Вычислены критические индексы граничной сингулярности как для нулей Янга–Ли так и для фишеровских нулей.

§1. ВВЕДЕНИЕ

В 1952 Янг и Ли [1] предложили теорию фазовых переходов, основанную на рассмотрении нулей статистической суммы. В работе [1] статистическая сумма модели Изинга была представлена в виде полинома от активности ($e^{H/kT}$, где H – внешнее магнитное поле, kT – температура) и изучены распределения нулей статистической суммы в комплексной плоскости активности (Янга–Ли нули). Была доказана теорема о нахождении нулей Янга–Ли ферромагнитной модели Изинга на единичной окружности (в комплексной плоскости $e^{H/kT}$). В работах [1] – [3] на основе данного подхода, было рассмотрено возникновение сингулярностей в термодинамическом пределе и получен ряд результатов о связи между распределением нулей статистической суммы в комплексной плоскости и поведением термодинамических функций.

Впоследствии были определены нули Фишера статистической суммы в комплексной плоскости температуры [4] и для ряда моделей статистической физики нули Поттса (хроматические нули) в комплексной плоскости хроматического числа Q [5]. Также были рассмотрены нули статистической суммы в калибровочных моделях [6].

В данной работе изучены распределения нулей статистической суммы и критические индексы одномерной модели Блюме–Капела.

§2. НУЛИ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Рассматриваемая в работе одномерная модель Блюме–Капела определяется гамильтонианом :

$$-\beta H = J\sum_{i=1}^{N} s_i s_{i+1} + \Delta\sum_{i=1}^{N} s_i^2 + h\sum_{i=1}^{N} s_i, \tag{1}$$

где каждая переменная s_i принимает значения $0, \pm 1$ и удовлетворяет циклическому граничному условию $s_{N+1} = s_1$, причём $J, \Delta, h \in \mathbb{R}^1$. Статистическая сумма модели определяется как (см. [1]) :

$$Z_n = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H}, \tag{2}$$

где суммирование ведётся по всему множеству значений $\{s_1, s_2, \dots s_N\}$.

В рамках трансфер–матричного подхода статистическую сумму можно записать как (см. [7]) :

$$Z_N = Sp\, V^N, \tag{3}$$

где

$$V(s_i, s_{i+1}) = \exp\left\{ J s_i s_{i+1} + \Delta \frac{s_i^2 + s_{i+1}^2}{2} + h\frac{s_i + s_{i+1}}{2} \right\}$$

является трансфер–матрицей модели. Трансфер–матрица, являясь симметричной вещественной матрицей, легко диагонализируется с помощью ортогонального преобразования (см. [8], [9]). Отсюда следует, с учётом циклических свойств следа матрицы, что статистическую сумму данной системы мы можем представить в диагональном виде

$$Z_n = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N, \tag{4}$$

где λ_i – собственные значения трансфер–матрицы. Характеристическое уравнение $\det(V - \lambda E) = 0$ для трансфер–матрицы сводится к кубическому уравнению

$$\begin{aligned} &\lambda^3 - \left(1 + e^{J+\Delta} x\right)\lambda^2 - \left[x e^{\Delta}\left(1 - e^{J}\right) + e^{2\Delta}\left(e^{-2J} - e^{2J}\right)\right]\lambda - \\ &- e^{2\Delta}\left(e^{2J} - 1\right)\left(1 - e^{-J}\right)^2 = 0, \end{aligned} \tag{5}$$

где $x = e^{-h} + e^{h}$. Предполагая, что λ_1 максимальное по модулю собственное значение, получаем

$$Z_N = \lambda_1^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N + \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^N\right]. \tag{6}$$

При $N \to \infty$ (термодинамический предел), вклад в сумму (6) вносят лишь равные наибольшему по модулю собственные значения. При термодинамическом пределе остальными членами суммы отличными от единицы в скобках можно пренебречь. Имеет место следующее утверждение.

Теорема 1. *Пусть J, Δ, h – комплексные числа и $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3|$. Тогда нули статистической суммы определяются из уравнения*

$$F(h, \Delta, J, \varphi) = 0,$$

$$F(h, \Delta, J, \varphi) \equiv -a_0^2\left(1 + e^{i\varphi} + e^{2i\varphi}\right)^3 - a_1^2 e^{2i\varphi}\left[-a_0^2 e^{i\varphi} + a_1\left(1 + e^{i\varphi}\right)^2\right] +$$

$$+ a_0 a_2 e^{i\varphi}\left[-a_2^2 e^{i\varphi}\left(1 + e^{i\varphi}\right)^2 + a_1\left(1 + e^{i\varphi} + e^{2i\varphi}\right)\left(1 + 4e^{i\varphi} + e^{2i\varphi}\right)\right], \tag{7}$$

где

$$\varphi \equiv \varphi_p = \frac{2p+1}{N}\pi, \quad p = 0, \ldots, N-1. \tag{8}$$

Доказательство. В случае $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3|$ мы можем пренебречь третьим членом суммы (6) и записать её в виде $Z_N = \lambda_1^N\left(1 + e^{i\varphi N}\right)$, где φ – разность фаз между λ_1 и λ_2. Так как нас интересуют нули статистической суммы ($Z_N = 0$), то отсюда легко получить условие на разность фаз между максимальными собственными значениями трансфер–матрицы в виде (8).
Так как характеристическая функция кубическая, то получаем

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = a_2 \equiv 1 + e^{J+\Delta}x,$$

$$\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1 = a_1 \equiv xe^{\Delta}(e^{J} - 1) + e^{2\Delta}\left(e^{2J} - e^{-2J}\right),$$

$$\lambda_1\lambda_2\lambda_3 = a_0 \equiv e^{2\Delta}\left(1 - e^{2J}\right)\left(1 - e^{-J}\right)^2. \tag{9}$$

Учитывая, что $\lambda_1 = \lambda_2 e^{i\varphi}$, после небольших преобразований получаем уравнение (7).
Решая алгебраическое уравнение четвёртой степени (7) относительно $\mu = e^h \in \mathbb{C}^1$, при заданных значениях параметров $J, \Delta \in \mathbb{R}^1$ и углах φ, определяемых из условия (8), получаем нули Янга–Ли в комплексной плоскости внешнего магнитного поля.

Для удобства рассмотрения фишеровских нулей, переопределим параметры системы как $h = J\overline{h}$ и $\Delta = J\overline{\Delta}$. Тогда решениями уравнения (7) по $c = e^{-J} \in \mathbb{C}^1$ при заданных значениях $\overline{h}, \overline{\Delta} \in \mathbb{R}^1$ и углах φ, определяемых из условия (8), будут фишеровскими нулями в комплексной плоскости температуры.

Если $\overline{h}, \overline{\Delta} \in \mathbb{Q}$, т.е. рациональные числа, то уравнение (7) сводится к алгебраическому уравнению степени выше четвёртой. В общем случае оно трансцендентно. Теорема доказана.

Примеры распределений нулей Янга–Ли в комплексной плоскости внешнего поля приведены на Рис. 1. Как видно из распределений, в рассматриваемых случаях не выполняется теорема Янга–Ли о расположении нулей на единичной окружности [1, 3]. На Рис. 2 даны примеры численных решений уравнения (7) для фишеровских нулей.

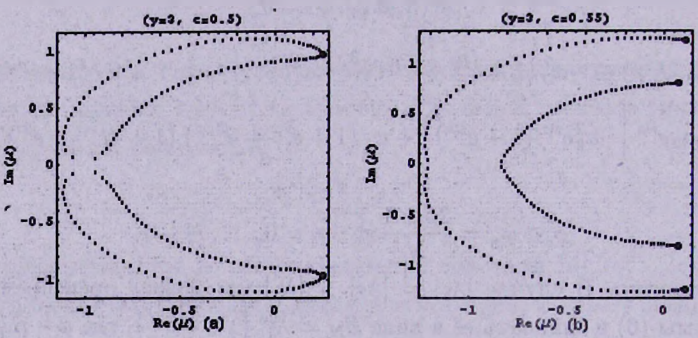

Рис. 1 Примеры распределений нулей Янга–Ли в комплексной плоскости внешнего магнитного поля для $N = 100$. Жирными точками обозначены граничные точки. Используются обозначения $c = e^{-J}$, $y = e^{\Delta}$, $\mu = e^{h}$.

§ 3. ПЛОТНОСТЬ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НУЛЕЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Определение 1. Пусть $\mu(\varphi)$ – взаимно-однозначное, гладкое отображение множества значений параметра $\varphi \in \mathbb{R}^1$ во множество комплексных нулей статистической суммы (Янга–Ли, фишеровские, хроматические нули). Функцию

$$g(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial \operatorname{Re} \mu}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial \operatorname{Im} \mu}{\partial \varphi}\right)^2}} \tag{10}$$

мы назовём плотностью нулей заданной статистической суммы.

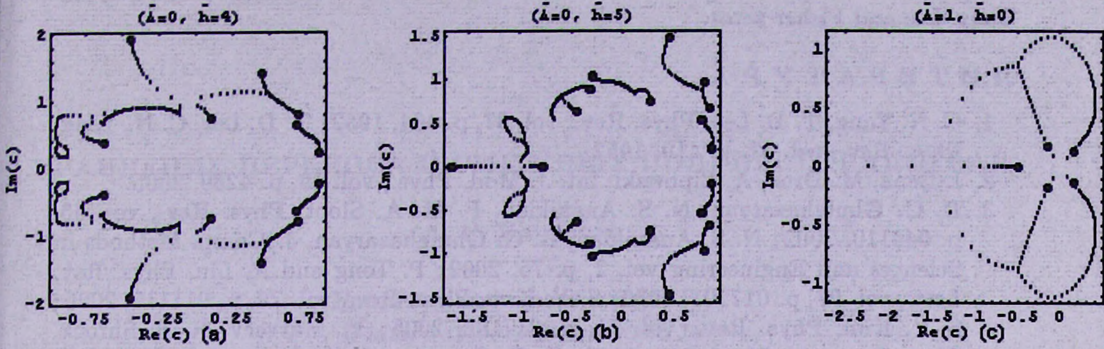

Рис. 2 Примеры распределений фишеровских нулей в комплексной плоскости внешнего магнитного поля для $N = 1000$. Жирными точками обозначены граничные точки.

Для заданного взаимно–однозначного отображения $\mu(\varphi)$, можно определить взаимно–однозначное гладкое отображение $\vartheta(\varphi)$ на интервале $\varphi \in \mathbb{R}^1$, где ϑ есть угол в полярных координатах точки $\mu(\varphi)$ на комплексной плоскости.

Определение 2. Если плотность распределения нулей статистической суммы имеет сингулярность вида $g(\varphi(\theta)) \propto |\theta - \theta_e|^\sigma$ в достаточно малой окрестности точки ϑ_e, то мы назовём такую сингулярность **граничной сингулярностью**, $\mu(\vartheta_e)$ – **граничной точкой**, а степень $\sigma \in \mathbb{R}^1$ – **критическим индексом** данной сингулярности.

Мы пока не получили общее аналитическое доказательство, тем не менее численные расчёты показывают, что граничные точки определяются из уравнения (7) при значении параметра $\varphi = 0$.

В граничных точках при различных значениях J, Δ и h, путём разложения уравнения (7) в ряд Тейлора в окрестности точки $\varphi = 0$, получены Янга–Ли и фишеровские граничные сингулярности с критическим индексом равным $\sigma = 1/2$.

Abstract. The zeros of a partition function permit to reveal the singularities of thermodynamical functions. The paper considers singularities of the partition function in the complex plane of the outer magnetic field (Yang–Lee zeros) or of the temperature (Fisher zeros) for the Blume–Capel one-dimensional model with spin 1 and obtains analytical expressions for all three eigenvalues of the transfer matrix. The distribution and the distribution density of the partition function are obtained by excluding the eigenvalue that is the least by modulus. The graphs of Yang–Lee zero distributions of the outer magnetic field and the graphs of the Fisher zeros of

temperatures are given together with the critical indices of the edge singularity for Yang–Lee and Fisher zeros.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. N. Yang, T. D. Lee, Phys. Rev., vol. 87, p. 404, 1952; T. D. Lee, C. N. Yang, Phys. Rev., vol. 87, p. 410, 1952.
2. I. Bena, M. Droz, A. Lipowski, Int. J. Mod. Phys., vol. 19, p. 4269, 2005.
3. R. G. Ghulghazaryan, N. S. Ananikian, P. M. A. Sloot, Phys. Rev., vol. 66, p. 046110, 2002; N. S. Ananikian, R. G. Ghulghazaryan, J. Comp. Methods in Sciences and Engineering vol. 2, p. 75, 2002; P. Tong and X. Liu, Phys. Rev. Lett., vol. 97, p. 017201, 2006; S.-Y. Kim, Phys. Rev., vol. 74, p. 011119, 2006; S.-Y. Kim, Phys. Rev., vol. 71, p. 017102, 2005; V. Matveev, R. S. Shrock, Phys. Rev., vol. 53, p. 254, 1996; К. Г. Саргсян, Л. Н. Ананикян, Изв. НАН РА, Физика, том 41, стр. 333, 2006.
4. Д. Рюэль, Статистическая механика. Строгие результаты, Мир, Москва, 1971.
5. M. E. Fisher, Lectures in Theoretical Physics. vol. 7C ed. W. E. Brittin (Boulder, CO : University of Colorado Press, 1965.
6. J. Salas, A. D. Sokal, J. Stat. Phys., 104, 314 (2001); N. Biggs, J. Comb. Theory, B 82, 19 (2001); R.G. Ghulghazaryan, N.S. Ananikian. J.Phys. A 36, 6297 (2003).
7. M. A. Stephanov, Phys. Rev. D 73, 094508 (2006); H. R. Christiansen, A. C. Petkou et al, Phys. Rev. D 62, 025018 (2000); В. С. Погосян, Изв. НАН РА, Физика, том 40, стр. 235, 2005.
8. Д. Рюэль, Термодинамический формализм. Математические структуры классической равновесной статистической механики. РХД, 2002.
9. Р. Беллман, Введение в теорию матриц, Наука, Москва, 1976.

Поступила 2 сентября 2006