ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, *2019*, *том 489*, *№ 3*, *с. 246–249*

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 536.71-77

СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ МАТРИЦЫ СВЯЗИ МОДЕЛИ ИЗИНГА: УЧЁТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С СОСЕДЯМИ, СЛЕДУЮЩИМИ ЗА БЛИЖАЙШИМИ

Член-корреспондент РАН Б. В. Крыжановский*, Л. Б. Литинский**

Поступило 22.05.2019 г.

Исследуется матрица связи модели Изинга на d-мерном гиперкубе. Помимо взаимодействия между ближайшими соседями, учитывается взаимодействие с соседями, следующими за ближайшими. Для такой матрицы получены точные выражения для собственных значений и собственных векторов, которые весьма просто выражаются через соответствующие характеристики одномерной модели Изинга. Рассмотрены как периодические, так и свободные граничные условия.

Ключевые слова: собственное значение, собственный вектор, модель Изинга, граничные условия, статсумма, распределение энергий.

DOI: https://doi.org/10.31857/S0869-56524893246-249

1. ВВЕДЕНИЕ

Мы получим точные выражения для собственных значений и собственных векторов матрицы связи, отвечающей модели Изинга на гиперкубе размерности $d > 1$. Взаимодействие спина с ближайшими соседями полагаем равным 1. Взаимодействие с соседями, следующими за ближайшими, для краткости будем называть “взаимодействием со следующими соседями”. Для d-мерной ($d > 1$) модели Изинга будем считать это взаимодействие отличным от нуля и обозначим его через b. Собственные значения d-мерной модели с $b \neq 0$ удаётся выразить через собственные значения одномерной модели Изинга ($d = 1$), в которой взаимодействуют только ближайшие соседи.

Знание спектра матрицы связей модели Изинга находит применение в различных приложениях [1–4]. Это обусловлено тем, что матрицей связи — обозначим её $\mathbf{A}$ — полностью определяется энергия $E(\mathbf{s})$ состояния $\mathbf{s}$: $E(\mathbf{s}) \sim \mathbf{sAs}^{+}$. Для вычисления статистической суммы, например, необходимо знать плотность распределения энергий, которая полностью определяется собственными значениями и собственными векторами матрицы $\mathbf{A}$.

Рассмотрим одномерную модель Изинга из n спинов, в которой взаимодействуют только ближайшие соседи. Матрица связи ($n \times n$) такой системы имеет вид

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & . & . & g \\ 1 & 0 & 1 & 0 & . & . & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & . & . & 1 & 0 & 1 \\ g & 0 & 0 & . & . & 1 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (1)$$

Фигурирующая в (1) переменная g определяет тип граничных условий:

(i) Случай $g = 1$ отвечает периодическим граничным условиям, которые получают, замыкая линейную цепочку спинов в кольцо и считая n-й спин ближайшим соседом первого спина. Все спины здесь равноправны. Собственные значения матрицы (1) при $g = 1$ хорошо известны [1, 2]:

$$\lambda_k = 2 \cdot \cos\left[\frac{2\pi(k-1)}{n}\right], \quad k = 1, 2, \ldots, n. \qquad (2)$$

Первое собственное значение является наибольшим: $\lambda_1 = 2$. Когда $n = 2m$, имеется ещё одно невырожденное собственное значение $\lambda_{m+1} = -2$. Остальные собственные значения являются дважды вырожденными ($\lambda_k = \lambda_{n-k+2}$ при $k > 1$ и $k \neq m + 1$). Когда n нечётно, невырожденным будет только наибольшее собственное значение λ_1, а остальные собственные значения дважды вырождены. Для определённости дальнейших рассуждений будем полагать n чётным: $n = 2m$.

(ii) Случай $g = 0$ отвечает свободным граничным условиям. Собственные значения соответствующей матрицы (1) имеют вид (см. [4, 5])

Федеральный научный центр
Научно-исследовательский институт
системных исследований
Российской Академии наук, *Москва*
**E-mail*: *kryzhanov@mail.ru*
***E-mail*: *litin@mail.ru*

$$\lambda_k = 2 \cdot \cos\left(\frac{\pi k}{n+1}\right), \quad k = 1, 2, \ldots, n. \tag{3}$$

Вырожденных собственных значений здесь нет вовсе. Зато для каждого собственного значения имеется противоположное ему по знаку: $\lambda_k = -\lambda_{n-k+1}$. Для нечётного n одно из собственных значений равно нулю.

Введём используемые ниже обозначения: $\mathbf{f}_k$ — собственные векторы матрицы $\mathbf{A}_1$ ($k = 1, 2, \ldots, n$); $f_k^{(i)}$ — i-я компонента ($i = 1, 2, \ldots, n$) вектора $\mathbf{f}_k$. Выражения для $\mathbf{f}_k$ здесь несущественны, и мы их не приводим: для периодических граничных условий соответствующие выражения приведены в [1, 2]; для свободных граничных аналогичные выражения имеются в [4, 5].

2. СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Рассмотрим планарную модель Изинга: $d = 2$. Примем, что взаимодействие между ближайшими соседями одинаково и равно 1, а взаимодействие со следующими соседями $b \neq 0$. Спин, являющийся "следующим соседом", находится на расстоянии диагонали квадрата от исходного спина. Каждый спин принадлежит одновременно четырём квадратам, так что у спина всего имеется 4 ближайших соседа и 4 следующих соседа.

Взаимодействие в планарной модели описывается квадратной $(n^2 \times n^2)$-матрицей связей $\mathbf{A}_2$. Эту матрицу удобно записать в блочном виде:

$$\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & g\mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_1 & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \mathbf{A}_1 & \mathbf{B}_1 \\ g\mathbf{B}_1 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}_1 = \mathbf{I}_1 + b\mathbf{A}_1, \tag{4}$$

где $\mathbf{I}_1$ — единичная $(n \times n)$-матрица. Собственный вектор матрицы $\mathbf{A}_2$ также запишем в блочном виде: $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n)$, где n-мерный вектор-строка $\mathbf{x}_i$ принадлежит i-му n-мерному подпространству, на которые естественным образом расщепляется n^2-мерное пространство, в котором действует матрица $\mathbf{A}_2$. Задача на собственные значения для матрицы $\mathbf{A}_2$ имеет вид

$$\mathbf{A}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^+ \\ \mathbf{x}_2^+ \\ \ldots \\ \mathbf{x}_n^+ \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^+ \\ \mathbf{x}_2^+ \\ \ldots \\ \mathbf{x}_n^+ \end{pmatrix}, \tag{5}$$

где верхний индекс «$^+$» означает эрмитово сопряжение, а $\mathbf{x}_i^+$ есть вектор-столбец. Уравнение (5) эквивалентно системе n-мерных векторных уравнений:

$$\begin{array}{ccccccc} \mathbf{A}_1\mathbf{x}_1^+ & + & \mathbf{B}_1\mathbf{x}_2^+ & + & g\mathbf{B}_1\mathbf{x}_n^+ & = & \mu\mathbf{x}_1^+, \\ \mathbf{B}_1\mathbf{x}_1^+ & + & \mathbf{A}_1\mathbf{x}_2^+ & + & \mathbf{B}_1\mathbf{x}_3^+ & = & \mu\mathbf{x}_2^+, \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ g\mathbf{B}_1\mathbf{x}_1^+ & + & \mathbf{B}_1\mathbf{x}_{n-1}^+ & + & \mathbf{A}_1\mathbf{x}_n^+ & = & \mu\mathbf{x}_n^+. \end{array} \tag{6}$$

Собственные векторы матрицы $\mathbf{A}_2$ будем искать в виде кронекеровых произведений собственных векторов матрицы $\mathbf{A}_1$:

$$\mathbf{F}_{kr} = \mathbf{f}_k \otimes \mathbf{f}_r. \tag{7}$$

Семейство векторов $\mathbf{F}_{kr}$ является полным ортонормированным набором. Покажем, что векторы $\mathbf{F}_{kr}$ являются собственными векторами матрицы $\mathbf{A}_2$:

$$\mathbf{A}_2\mathbf{F}_{kr}^+ = \mu_{kr}\mathbf{F}_{kr}^+,$$

где μ_{kr} — соответствующее собственное значение. Подставим $\mathbf{X} = \mathbf{F}_{kr}$ и $\mu = \mu_{kr}$ в (5), (6) в качестве разыскиваемых собственного вектора и собственного значения. Ясно, что n-мерные векторы $\mathbf{x}_i$ принимают вид $\mathbf{x}_i = f_k^{(i)}\mathbf{f}_r$. Тогда с учётом очевидных соотношений $\mathbf{A}_1\mathbf{x}_i^+ = f_k^{(i)}\lambda_r\mathbf{f}_r^+$ и $\mathbf{B}_1\mathbf{x}_i^+ = f_k^{(i)}(1 + b\lambda_r)\mathbf{f}_r^+$ систему векторных уравнений (6) можно заменить системой скалярных уравнений. Действительно первое из уравнений (6) в результате такой подстановки преобразуется к виду

$$[(\lambda_r - \mu_{kr})f_k^{(1)} + (1 + b\lambda_r)f_k^{(2)} + \\ + g(1 + b\lambda_r)f_k^{(n)}]\mathbf{f}_r^+ = 0.$$

Отсюда следует $f_k^{(2)} + gf_k^{(n)} = \nu_{kr}f_k^{(1)}$, где введена новая характеристика

$$\nu_{kr} = \frac{\mu_{kr} - \lambda_r}{1 + b\lambda_r}. \tag{8}$$

Действуя аналогичным образом, сведём (6) к системе n скалярных уравнений

$$\begin{array}{cccccccccccc} 0 & + & f_k^{(2)} & + & 0 & + & \ldots & 0 & + & gf_k^{(n)} & = & \nu_{kr}f_k^{(1)}, \\ f_k^{(1)} & + & 0 & + & f_k^{(3)} & + & \ldots & 0 & + & 0 & = & \nu_{kr}f_k^{(2)}, \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ gf_k^{(1)} & + & 0 & + & 0 & + & \ldots & f_k^{(n-1)} & + & 0 & = & \nu_{kr}f_k^{(n)}. \end{array} \tag{9}$$

Система (9) есть в точности задача на собственные значения для матрицы $\mathbf{A}_1$: $\mathbf{A}_1\mathbf{f}_k^+ = \nu_{kr}\mathbf{f}_k^+$. Отсюда сразу следует соотношение $\nu_{kr} = \lambda_k$. С учётом этого соотношения из (8) для собственных значений матрицы $\mathbf{A}_2$ получаем

$$\mu_{kr} = \lambda_k + \lambda_r + b \cdot \lambda_k\lambda_r, \quad k, r = 1, 2, ..., n, \quad (10)$$

где собственные значения одномерной задачи λ_k в случае периодических ($g = 1$) или свободных ($g = 0$) граничных условий даются выражениями (2) или (3) соответственно. Это и есть результат, к которому мы стремились. Заметим, что очевидным образом выполняется равенство $\mu_{kr} = \mu_{rk}$. При $b = 0$ выражение (10) совпадает с выражением, полученным в [2] без учёта взаимодействия со следующими соседями. Выражениями (7) и (10) полностью описываются решение задачи на собственные векторы и соответствующие им собственные значения для планарной модели Изинга при наличии взаимодействия со следующими соседями.

3. СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ТРЁХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Рассмотрим трёхмерную модель Изинга. В этом случае взаимодействие спина с шестью ближайшими соседями одинаково и равно 1. Кроме того, спин имеет 12 следующих соседей, взаимодействие с которыми будем считать отличным от нуля: $b \neq 0$. По-прежнему следующие соседи отстоят от спина на расстояние диагонали квадрата, но таких квадратов вокруг каждого спина будет 12.

Взаимодействие в трёхмерной модели описывается квадратной $(n^3 \times n^3)$-матрицей связей $\mathbf{A}_3$, которую удобно представить в блочном виде через $(n^2 \times n^2)$-матрицы:

$$\mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 & 0 & 0 & ... & 0 & g\mathbf{B}_2 \\ \mathbf{B}_2 & \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 & 0 & ... & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 & ... & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{A}_2 & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ... & \mathbf{A}_2 & \mathbf{B}_2 \\ g\mathbf{B}_2 & 0 & 0 & 0 & ... & \mathbf{B}_2 & \mathbf{A}_2 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где

$$\mathbf{B}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 & b\mathbf{I} & 0 & 0 & ... & 0 & gb\mathbf{I} \\ b\mathbf{I} & \mathbf{B}_1 & b\mathbf{I} & 0 & ... & 0 & 0 \\ 0 & b\mathbf{I} & \mathbf{B}_1 & b\mathbf{I} & ... & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b\mathbf{I} & \mathbf{B}_1 & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & 0 & 0 & ... & \mathbf{B}_1 & b\mathbf{I} \\ gb\mathbf{I} & 0 & 0 & 0 & ... & b\mathbf{I} & \mathbf{B}_1 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Задача на собственные векторы и собственные значения $\mathbf{A}_3\mathbf{Y}^+ = \mu\mathbf{Y}^+$, где $\mathbf{Y}$ — n^3-мерный вектор-строка, решается по аналогии с предыдущим разделом. Во-первых, собственные векторы матрицы $\mathbf{A}_3$ представим в виде кронекерова произведения собственных векторов одномерной модели:

$$\mathbf{F}_{krm} = \mathbf{f}_k \otimes \mathbf{f}_r \otimes \mathbf{f}_m, \quad k, r, m = 1, 2, ..., n. \quad (13)$$

Во-вторых, заметим, что блочная структура матрицы $\mathbf{A}_3$ аналогична блочной структуре матрицы $\mathbf{A}_2$. Поэтому если мы разобьём вектор $\mathbf{Y}$ на n блоков по n^2 компонент в каждом $\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, ..., \mathbf{y}_n)$, то уравнение $\mathbf{A}_3\mathbf{Y}^+ = \mu\mathbf{Y}^+$ разобьётся на n векторных уравнений, аналогичных (6). Эти уравнения получаются из (6) заменой $\mathbf{A}_1 \to \mathbf{A}_2$, $\mathbf{B}_1 \to \mathbf{B}_2$ и $\mathbf{x}_i \to \mathbf{y}_i$. В свою очередь, каждое из полученных векторных уравнений также имеет блочную структуру, аналогичную (6). Разбивая векторы $\mathbf{y}_i$ на блоки по n компонент, мы придём к уравнениям типа (9), т.е. сведём нашу задачу к задаче о собственных значениях для одномерной модели. При этом мы убедимся, что описываемые выражением (13) векторы $\mathbf{F}_{krm}$ являются собственными векторами матрицы $\mathbf{A}_3$, а соответствующие им собственные значения μ_{krm} описываются выражением

$$\mu_{krm} = \lambda_k + \lambda_r + \lambda_m + b(\lambda_k\lambda_r + \lambda_k\lambda_r + \lambda_r\lambda_m), \quad k, r, m = 1, 2, ..., n, \quad (14)$$

где λ_k суть собственные значения одномерной задачи (2) или (3). Заметим, что величина μ_{krm} не зависит от порядка индексов ($\mu_{krm} = \mu_{kmr} = \mu_{rmk} = ...$). Это означает, что вырожденность собственных значений в трёхмерной модели существенно больше, чем в одномерной модели. При $b = 0$ выражение (14) совпадает с выражением, полученным в [2] без учёта взаимодействия со следующими соседями.

4. ОБОБЩЕНИЕ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Проведённый выше анализ показал, что учёт следующих соседей существенным образом изменяет вид собственных значений, в то время как вид собственных векторов остаётся неизменным при любом значении параметра b.

Нетрудно сообразить, как будет выглядеть обобщение полученных результатов на случай d-мерной модели Изинга произвольной размерности $d > 3$. Соответствующая $(n^d \times n^d)$-матрица связей $\mathbf{A}_d$ имеет аналогичную (4) и (11) блочную структуру. Конечные выражения для собственных векторов и собственных значений выпишем без пояснений:

$$\mathbf{F}_{k_1k_2\ldots k_d} = \mathbf{f}_{k_1} \otimes \mathbf{f}_{k_2} \otimes \ldots \otimes \mathbf{f}_{k_d},$$
$$\mu_{k_1,k_2\ldots,k_d} = \sum_{i=1}^{d} \lambda_{k_i} + b\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d} \lambda_{k_i}\lambda_{k_j}, \quad (15)$$

где $k_1, k_2, \ldots, k_d = 1, 2, \ldots, n$.

Отметим, что с ростом размерности d решётки вырождение собственных значений резко возрастает: положив в выражении (15) $b = 0$, получим, что собственное значение есть сумма собственных значений одномерной задачи: $\mu_{k_1,k_2\ldots,k_d} = \sum_{i=1}^{d} \lambda_{k_i}$ и, следовательно, оно d! раз вырождено. Проведённый выше анализ показал, что учёт взаимодействия со следующими соседями этого вырождения не снимает.

Мы планируем распространить полученные результаты на ситуацию, когда учитывается взаимодействие не только со следующими соседями, но и со следующими после них соседями, и даже с ещё более далёкими соседями. При этом хочется сохранить общий принцип: собственные значения многомерной модели Изинга выражаются правильными комбинациями собственных значений одномерной модели. Пока неясно: всегда ли можно обойтись исключительно собственными значениями λ_k одномерной модели с ближайшими соседями или в качестве λ_k придётся использовать собственные значения одномерной модели Изинга со следующими соседями? Этот вопрос требует исследования.

Источник финансирования. Работа выполнена в рамках государственного задания ФНЦ НИИСИ РАН № 0065-2019-0003.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Волькенштейн М.В.*, *Грибов Л.А.*, *Ельяшевич М.А.*, *Степанов Б.И.* Колебания молекул. М.: Наука, 1972.
2. *Dixon J.M.*, *Tuszynski J.A.*, *Nip M.L.A.* Exact Eigenvalues of the Ising Hamiltonian in One-, Two- and Three-Dimensions in the Absence of Magnetic Field // Physica A. 2001. V. 289. P. 137–156.
3. *Baxter R.J.* Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. L.: Academic Press, 1982.
4. *Fidder H.*, *Knoester J.*, *Wiersma D.A.* Optical Properties of Disordered Molecular Aggregates: A Numerical Study // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. № 11. P. 7880–7890.
5. *Grenander U.*, *Szego G.* Toeplitz Forms ant Their Applications. Berkley, Los Angeles: Univ. California Press, 1958.

CONNECTION-MATRIX EIGENVALUES IN THE ISING MODEL: TAKING INTO ACCOUNT INTERACTION WITH NEXT-NEAREST NEIGHBORS

Corresponding Member of the RAS B. V. Kryzhanovsky, L. B. Litinskii

Scientific Research Institute for System Analysis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

Received May 22, 2019

The connection matrix of the Ising model on a d-dimensional hypercube is investigated. In addition to the interactions between the nearest neighbors, the interactions between the next-nearest neighbors are taken into account. For such a matrix, the exact relations for the eigenvalues and eigenvectors, which are reasonably simply expressed through the corresponding characteristics of the one-dimensional Ising model, are obtained. Both periodic and free boundary conditions are considered.

Keywords: eigenvalues, eigenvectors, the Ising model, boundary conditions, partition function, energy distribution.