

ОБ ЭНТРОПИИ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ЛЬДА

В.Б.Приезжев

Энтропия двумерной модели льда вычислена методом диагональной трансфер-матрицы. Для удельной энтропии $S = k \ln W$ получено $w = 27/16$, что превышает известное значение $w = (4/3)^{3/2}$ почти на 10%.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

On Entropy of Two-Dimensional Ice Model

V.B.Priezzhev

The entropy of the two-dimensional ice model has been found by the diagonal-to-diagonal transfer matrix method. The entropy per lattice site is $S = k \ln W$ with $w = 27/16$ what exceeds the known value $w = (4/3)^{3/2}$ by almost 10%.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Энтропия двумерного льда известна с 1967 года, когда Либ работой^{1/} положил начало исследованиям решеточных моделей методом анзаца Бете. Годом раньше Нейгл^{2/} подытожил серию работ по приближенному вычислению этой величины. Результаты Либа и Нейгла оказались в замечательном согласии между собой. Для молекулярной свободы W , связанной с удельной энтропией S соотношением $S = k \ln W$, Нейгл привел оценку

$$W = 1,540 \pm 0,001, \quad (1)$$

а Либ для периодических граничных условий нашел точное значение

$$W = \left(\frac{4}{3}\right)^{3/2} = 1,5396 \dots \quad (2)$$

В первом же обзоре точных результатов в двумерных ферро-электрических моделях^{3/} была сформулирована проблема эквивалентности периодических и свободных граничных условий. Решение этой проблемы не получено до сих пор, как не найдено точного решения 6-вершинной модели для произвольных граничных условий.

Вопрос о граничных условиях можно поставить и по-другому: эквивалентны ли периодические условия в различных направлениях решетки? Обычно метод трансфер-матрицы и анзац Бете применяются для решеток, свернутых в цилиндр вдоль одного из основных векторов решетки. Ниже будет показано, что для квадратной решетки, свернутой в цилиндр вдоль диагонали квадрата,

$$W = \frac{27}{16} = 1,6875, \quad (3)$$

что почти на 10% превышает значение W для обычных граничных условий.

Темперли и Либ^{4/} первыми предложили рассматривать решетку, повернутую на $\pi/4$ относительно координатных осей. В работе^{3/} трансфер-матрица между диагоналями использовалась для решения 20-вершинной модели на треугольной решетке, параметризованной тремя весовыми множителями. Келланд^{5/} обобщил это решение на случай 10 параметров. Общая 20-вершинная модель содержит в себе 6-вершинную модель на квадратной решетке, но введенные в^{3/} и^{5/} ограничения не позволяют выделить явное решение для этого частного случая. Тем не менее при построении трансфер-матрицы для интересующей нас задачи можно воспользоваться рецептами, изложенными в^{3/} и^{5/}.

Рассмотрим квадратную решетку из M строк, каждая из которых содержит N вершин. Между соседними строками имеется $2N$ связей, которые перенумерованы так, как показано на рис.1.

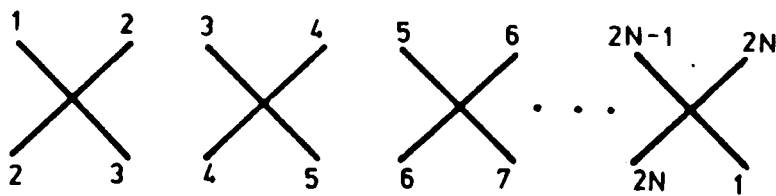


Рис.1

Каждая связь снабжена стрелкой, направленной в одном из двух возможных направлений. Шесть состояний узла в модели льда изображены на рис.2.

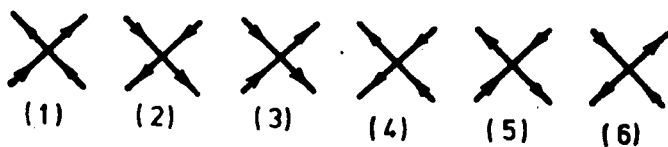


Рис.2

Все состояния имеют одинаковый вес, который полагается равным единице. Общее число конфигураций модели равно

$$Z = \text{Tr}(T^M), \quad (4)$$

где T — трансфер-матрица, связывающая состояния нижних и верхних связей одной строки. Обозначая через $\Lambda(N)$ максимальное собственное значение T в пределе $M \rightarrow \infty$, имеем

$$Z = \Lambda(N)^M, \quad (5)$$

и, следовательно,

$$W = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{M \rightarrow \infty} Z^{\frac{1}{MN}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda(N)^{\frac{1}{N}}. \quad (6)$$

Число стрелок, направленных вниз, одинаково для всех строк. Пусть $f(x_1, \dots, x_n)$ — амплитуда собственного вектора для конфигурации стрелок на нижних связях одной строки. Связи с номерами x_1, x_2, \dots, x_n содержат стрелки, направленные вниз. Введем обозначения:

$$\begin{aligned} x'_i &= x_i - 1, \text{ если } x_i \text{ четно,} \\ &= x_i - 2, \text{ если } x_i \text{ нечетно.} \end{aligned} \quad (7)$$

Уравнение на собственные значения имеет вид

$$\Lambda_n f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{y_1=x'_1}^{x'_1+1} \dots \sum_{y_n=x'_n}^{x'_n+1} f(y_1, \dots, y_n). \quad (8)$$

Знак $(*)$ означает, что суммирование проводится только по тем наборам $\{y_1, \dots, y_n\}$, в которых все $y_i, 1 \leq i \leq n$, различны. Анзац Бете запишем в форме

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_P a(P) \exp\left[i \sum_{j=1}^n k_{P(j)} x'_j\right], \quad (9)$$

где суммирование проводится по всем перестановкам чисел $1, 2, \dots, n$, n — четно. Для двух произвольных перестановок $P = \dots p, q, \dots$ и $Q = \dots q, p, \dots$ потребуем выполнения равенства

$$a(P) = B(p, q)a(Q), \quad (10)$$

где

$$B(p, q) = - \frac{1 + e^{2i(p+q)} - 2\Delta e^{2ip}}{1 + e^{2i(p+q)} - 2\Delta e^{2iq}}. \quad (11)$$

Система уравнений для волновых векторов k_1, \dots, k_n получается из условия периодичности

$$f(x_1, \dots, x_{n-1}, 2N+1) = f(1, x_1, \dots, x_{n-1}) \quad (12)$$

и имеет вид

$$e^{2ik_j N} = - \prod_{i=1}^n B(k_j, k_i). \quad (13)$$

При $\Delta = -1/2$ условия (10) ÷ (13) дают собственные значения уравнения (8):

$$\Lambda_n = \prod_{j=1}^n (e^{-2ik_j} + 1). \quad (14)$$

Заметим теперь, что после замены $\bar{k}_j = 2k_j$ выражения (11) и (13) приводятся к стандартному виду для модели льда с периодическими условиями вдоль стороны квадрата. Разница заключается в знаке Δ . Стандартные граничные условия в модели льда дают $\Delta = 1/2$. В нашем случае $\Delta = -1/2$. Для того чтобы различать плотности волновых векторов в первом и втором случаях, обозначим их соответственно $\rho_+(k)$ и $\rho_-(k)$. Функции $\rho_+(k)$ и $\rho_-(k)$ четны, что следует из известного свойства волновых векторов^{6/}:

$$\bar{k}_i = -\bar{k}_{n-i+1}. \quad (15)$$

Это свойство позволяет переписать выражение для собственных значений в виде

$$\Lambda_n = \prod_{j=1}^n 2 \cos k_j. \quad (16)$$

Второе отличие, вызванное изменением граничных условий — это значение n , при котором Λ_n достигает максимума. Стандартные граничные условия дают $n = N/2$. Очевидно, что при повороте

решетки на $\pi/4$ ровно половина стрелок на нижних связях каждой строки оказывается направленной вниз, так что $n = N$. Это удвоение числа волновых векторов соответствует тому, что для каждого вектора k_j из набора, являющегося решением системы уравнений (13), существует вектор $k_j + \pi$, также являющийся решением этой системы. Учитывая эти замечания, запишем выражение для максимального собственного значения $\Lambda(N)$ в виде

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \Lambda(N) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \Lambda_N = \frac{6}{-Q} \int \ln(2 \cos \frac{\bar{k}}{2}) \rho_-(\bar{k}) d\bar{k}, \quad (17)$$

где $Q = 2\pi/3$, что следует из определений $Q = \pi - \mu$ и $\cos \mu = -\Delta^{1/3}$. Сравним полученный результат с решением Либа^{1/1'}:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \Lambda(N) = -\frac{1}{2} \int_{-Q/2}^{Q/2} \ln 2(1 - \cos k) \rho_+(k) dk. \quad (18)$$

Если бы вместо 6-вершинной модели мы рассматривали 5-вершинную модель с запрещенными вершинами типа (2) на рис.2, то вместо (17) мы получили бы выражение

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \tilde{\Lambda}(N) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/3}^{\pi/3} \ln(2 \cos k) dk, \quad (19)$$

а вместо (18)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \tilde{\Lambda}(N) = -\frac{1}{4\pi} \int_{-\pi/3}^{\pi/3} \ln 2(1 - \cos k) dk \quad (20)$$

или, после элементарных преобразований,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \tilde{\Lambda}(N) = -\frac{1}{\pi} \int_{\pi/3}^{\pi - \pi/3} \ln |2 \cos k| dk. \quad (21)$$

Тождественность граничных условий в случае 5-вершинной модели следует из простого равенства

$$\int_0^{\pi} \ln |2 \cos k| dk = 0. \quad (22)$$

Нетрудно проверить, что 5-вершинная модель принадлежит к классу "свободных фермионов" (см. /7/, где дана классификация решеточных моделей). Таким образом, можно считать, что совпадение равенств (19) и (21) является следствием эквидистантности волновых векторов свободных фермионов, при которой $\rho(k) = \text{const}$ во всей области определения. Взаимодействие между фермионами приводит к искажению функции распределения $\rho(k)$, и тождественность граничных условий нарушается.

Переходя в (17) к новым переменным a с помощью соотношения

$$e^{ik} = \frac{e^{i\mu} - e^a}{e^{i\mu+a} - 1} \quad (23)$$

и используя известное решение /3/ для $\rho_-(\bar{k})$, получим

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \Lambda(N) &= \frac{3}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \frac{1}{\cosh \frac{3\alpha}{2}} \ln \left(\frac{2 \cosh \alpha + 2}{2 \cosh \alpha - 1} \right) = \\ &= \frac{3}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 dx}{x^6 + 1} \ln \left[\frac{x^4 + 2x^2 + 1}{x^4 - x^2 + 1} \right] = 3 \ln 3 - 4 \ln 2. \end{aligned} \quad (24)$$

Подставляя полученное выражение в (6), находим окончательный результат (3).

Обнаруженная зависимость энтропии от граничных условий в модели льда, вообще говоря, не является неожиданностью. Сохранение числа стрелок в определенном направлении отражает существование дальнедействующих корреляций, которые могут вызвать изменение термодинамических величин при изменении граничных условий. Но тогда возникает вопрос, почему метод рядов, не зависящий от граничных условий, дает результат, связанный с определенными граничными условиями? Возможный ответ состоит в следующем. При оценке точности метода в работе /2/ было сделано простое предположение относительно поведения остатка ряда: для отношения двух последовательных членов ряда ϕ_{n+2} и ϕ_n как функции $(1/n)$ при $n \rightarrow \infty$ был выбран линейный закон. Это предположение было основано на данных, полученных из метода трансфер-матрицы для решеток конечной ширины ($N \leq 7$). Но при этом рассматривались те же граничные условия, что и в /1/. Возможно, что рассмотренные нами граничные условия соответствуют сингулярному поведению отношения ϕ_{n+2}/ϕ_n . В таком случае вычисление W требует значительного увеличения длины ряда.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lieb E.H. — Phys.Rev.Lett., 1967, 18, p.692.
2. Nagle J.F. — J.Math.Phys., 1966, 7, p. 1484.
3. Lieb E.H. and Wu F.Y. In: "Phase Transitions and Critical Phenomena", vol.1, ed. by Domb and Green, Academic Press, London, New York, 1972.
4. Temperley H.N.V., Lieb E.H. — Proc.Roy.Soc. (London), 1971, A322, p.251.
5. Kelland S.B. — Aust.J.Phys., 1974, 27, p.813.
6. Yang C.N., Yang C.P. — Phys.Rev., 1966, 150, p.321.
7. Fan C., Wu F.Y. — Phys.Rev.B, 1970, 2, p.723.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 февраля 1988 года.