2. 2D Ising-mallin esitys vapaina fermioneina

Kun vuonna 1925 Ernst Ising ratkaisi nimeään kantavan ferromagnetismin mallin yhdessä ulottuvuudessa, hän virheellisesti väitti, että hänen tuloksensa ulottuu korkeampiin ulottuvuuksiin eikä mallilla ole spontaania magnetisaatiota. Rudolf Peierls kuitenkin osoitti vuonna 1936, että kahdessa ja korkeammissa ulottuvuuksissa Isingin mallin termodynaamisella rajalla on spontaati magnetisaatio matalissa lämpötiloissa. Tämä löytö teki Isingin mallista hyvin tärkeän tutkimuskohteen.

Vuonna 1941 Hendrik Kramers ja Gregory Wannier löysivät kaksiulotteisen Isingin mallin kriittisen lämpötilan neliöhilalla löytämällä eräänlaisen yhteyden mallin ja saman mallin ”duaalisella lämpötilalla” välillä. Sivuamme tätä alempana. Viimeistään Isingin mallin asema sementöityi, kun Lars Onsager ”ratkaisi mallin eksaktisti” (ilman ulkoista magneettikenttää, tosin) vuonna 1944 ilmestyneessä paperissaan. Esitämme tässä luvussa olennaisesti Onsagerin argumentin seuraten Schultzin, Mattisin ja Liebin vuonna 1964 ilmestynyttä artikkelia.

2.1. Ising-mallin siirtomatriisi

Tarkastelemme Ising-mallia suorakaiteessa $L = I \times J$, missä $I = [\![1, M]\!]$, $J = [\![1, N]\!]$. Jatkamme mallin tilan eli spinkonfiguraation $\sigma_{(i,j)} \in \{-1, +1\}$, $(i, j) \in L$, toteuttamaan *periodiset reunaehdot*

$$\begin{aligned} \sigma_{(M+1,j)} &= \sigma_{(1,j)} \\ \sigma_{(i,N+1)} &= \sigma_{(i,1)}. \end{aligned}$$

Periaatteessa tämän luvun laskut voitaisiin tehdä muillakin reunaehdoilla, mutta erityisesti luvussa 2.2.5 tämä valinta on näppärin.

Tarkastelemme anisotrooppista Ising-mallia, jonka Hamiltonin funktio on

$$H\big((\sigma_{(i,j)})_{(i,j)\in L}\big) = -\beta^{-1} \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N} \big(K_1\, \sigma_{(m,n)}\sigma_{(m,n+1)} + K_2\, \sigma_{(m,n)}\sigma_{(m+1,n)} + h\sigma_{(m,n)}\big)$$

jollain parametreilla $K_1, K_2 > 0$ ja $h \in \mathbb{R}$. Lopulta oletamme, että $K_1 = K_2$, mutta lasku kattaa anisotrooppisen tapauksen, $K_1 \neq K_2$, ja erilliset vakiot saattavat helpottaa laskujen seuraamista.

Huomautus IV.22. Yhteys tavanomaiseen Isingin mallin määritelmään tulee selväksi, kun asetamme $K_1 = K_2 = \beta$ ja $h = \beta B$.

Esitämme aliluvuissa 2.1.1 ja 2.1.2 tarvittavia aputuloksia. Varsinainen asia jatkuu aliluvussa 2.1.3.

2.1.1. *Paulin spinmatriisit*

Tarvitsemme tämän luvun laskuissa ns. Paulin spinmatriiseja, jotka määritellään

$$\boldsymbol{\tau}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\tau}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\tau}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{IV.12}$$

ja niihin liittyviä nosto- ja laskumatriiseja

$$\boldsymbol{\tau}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\tau}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{IV.13}$$

Näistä matriiseista emme tarvitse $\boldsymbol{\tau}^y$:tä alla, mutta se on esitelty tässä, jotta Paulimatriisien esittely olisi täydellisempi. Matriisit $\boldsymbol{\tau}^i$, $i \in \{x, y, z\}$ toteuttavat kaikilla $w \in \mathbb{C}$

$$\exp(w\boldsymbol{\tau}^i) = \cosh(w)\mathbf{I} + \sinh(w)\boldsymbol{\tau}^i = \cosh(w)\left(\mathbf{I} + \tanh(w)\boldsymbol{\tau}^i\right) \tag{IV.14}$$

koska $(\boldsymbol{\tau}^i)^2 = \mathbf{I}$. Tämä ominaisuus tulee käyttöön hyvin pian. Jätämme seuraavat yksityiskohdat harjoitustehtäviksi.

Tehtävä IV.5. Määritellään Paulin spinmatrisit $\boldsymbol{\tau}^x, \boldsymbol{\tau}^y, \boldsymbol{\tau}^z$ kuten kaavassa IV.12 ja niihin liittyvät nosto- ja laskumatriisit $\boldsymbol{\tau}^+, \boldsymbol{\tau}^-$ kuten kaavassa IV.13. Osoita seuraavat ominaisuudet.

(a) $(\boldsymbol{\tau}^i)^2 = \mathbf{I}$, $i \in \{x, y, z\}$

(b) $(\boldsymbol{\tau}^+)^2 = 0 = (\boldsymbol{\tau}^-)^2$ ja $[\boldsymbol{\tau}^+, \boldsymbol{\tau}^-]_+ = \mathbf{I}$

(c) $[\boldsymbol{\tau}^x, \boldsymbol{\tau}^y] = 2\mathrm{i}\,\boldsymbol{\tau}^z$, $[\boldsymbol{\tau}^y, \boldsymbol{\tau}^z] = 2\mathrm{i}\,\boldsymbol{\tau}^x$, $[\boldsymbol{\tau}^z, \boldsymbol{\tau}^x] = 2\mathrm{i}\,\boldsymbol{\tau}^y$

2.1.2. *Tensorituloista*

Koko tässä luvussa vektoriavaruudet ovat äärellisdimensioisia, joten voimme alla olettaa tämän aina tarvittaessa.

Teemme tässä pienen huomautuksen vektoriavaruuksien tensoritulosta ja lineaarikuvauksista. Jos V ja W ovat vektoriavaruuksia, merkitsemme $V \otimes W$ niiden tensorituloavaruutta. Avaruus $V \otimes W$ on siis vektoriavaruus ja on annettuna bilineaarinen[4] kuvaus $\otimes : (v, w) \mapsto v \otimes w$ karteesiselta tulolta $V \times W$ avaruudelle $V \otimes W$. Tensoriavaruudella on universaaliominaisuus, jonka mukaan millä tahansa bilineaarikuvauksella $f : V \times W \to U$, missä U on vektoriavaruus, on olemassa yksikäsitteinen lineaarikuvaus $F : V \otimes W \to U$ siten, että $f(v, w) = F(v \otimes w)$. Tämän ominaisuuden toteuttavat avaruudet $V \otimes W$ ja $V \otimes' W$ ovat isomorfisia, eli tensorituloavaruus on olennaisesti yksikäsitteinen.

Otamme tensorituloavaruuden konstruktioksi eksplisiittisen kannan antamisen. Jos $\{\underline{e}_i\}$ on V:n kanta ja $\{\underline{f}_j\}$ on W:n kanta, niin $V \otimes W$:n kanta on $\{\underline{e}_i \otimes \underline{f}_j\}$, eli nämä vektorit ovat lineaarisesti riippumattomia ja virittävät koko avaruuden $V \otimes W$. Bilineaarikuvaus $\otimes$ määritellään niin, että $\otimes : (\underline{e}_i, \underline{f}_j) \mapsto \underline{e}_i \otimes \underline{f}_j$ ja jatkamalla tämä koko joukkoon $V \times W$ vaatimalla bilineaarisuus. Matemaattisesti tämä määritelmän voisi tehdä siistimminkin ilman kannan valintaa, mutta nyt pitäisi kuitenkin olla selvää mitä tarkoitetaa vektoriavaruudella $\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m$, joka on isomofinen $\mathbb{C}^{nm}$:n kanssa. Tätä avaruutta abstraktimpiin vektoriavaruuksiin ei meillä ole aikomusta tensorituloja tässä käyttää.

Voimme määritellä myös lineaarikuvausten tensorituloja. Jos $T : V \to V$ ja $S : W \to W$ ovat lineaarikuvauksia, niin voimme määritellä lineaarikuvauksen $T \otimes S : V \otimes W \to V \otimes W$ siten, että vaadimme kantavektoreilla $T \otimes S : \underline{e}_i \otimes \underline{f}_i \mapsto (T\underline{e}_i) \otimes (S\underline{f}_i)$ ja jatkamamme tätä lineaarisesti. Erityisesti voimme määritellä lineaarikuvaukset $T \otimes \mathrm{id}_W$ ja $\mathrm{id}_V \otimes S$, missä $\mathrm{id}_U : U \to U$ on identiteettikuvaus.

[4] Eli molemmissa argumenteissa lineaarinen.

Tehtävä IV.6. Osoita, että kun V ja W ovat äärellisdimensioisia vektoriavaruuksia ja $T : V \to V$ ja $S : W \to W$ ovat lineaarikuvauksia, niin

(a) $[T \otimes \mathrm{id}_W, \mathrm{id}_V \otimes S] = 0$ ja

(b) $\exp(T \otimes \mathrm{id}_W) = \exp(T) \otimes \mathrm{id}_W$.

2.1.3. *Isingin mallin siirtomatriisi*

Muutamme kaksiulotteisen Isingin mallin partitiofunktion Z:n laskemisen lineaarialgebran ongelmaksi. Aloitamme yksiulotteisesta Isingin mallista.

Esimerkki IV.23 (Siirtomatriisi 1D Isingin mallille)**.** Tarkastellaan ensin yksiulotteista Ising-mallia, eli oletetaan, että $M = 1$ ja kirjoitetaan $\sigma_n = \sigma_{1,n}$. Partitiofunktio lasketaan määritelmänsä mukaan

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm1} \sum_{\sigma_2=\pm1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm1} \prod_{n=1}^{N} \exp(K_1 \sigma_n \sigma_{n+1}). \tag{IV.15}$$

Merkitään vierekkäisiä spinejä $\sigma = \sigma_n$ ja $\sigma' = \sigma_{n+1}$ ja tulkitaan jokainen summaus (IV.15):ssä matriisitulona (paitsi viimeinen, joka periodisilla reunaehdoilla tuottaa matriisin jäljen) matriisin

$$\mathbf{V}_1 = \begin{array}{c c} & \begin{array}{cc} \sigma = +1 & \sigma = -1 \end{array} \\ \begin{array}{c} \sigma' = +1 \\ \sigma' = -1 \end{array} & \begin{pmatrix} e^{K_1} & e^{-K_1} \\ e^{-K_1} & e^{K_1} \end{pmatrix} \end{array}$$

avulla. Näin Z saadaan N-kertaisen tulon jälkenä (trace)

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm1} (\mathbf{V}_1)_{\sigma_1,\sigma_2} (\mathbf{V}_1)_{\sigma_2,\sigma_3} \cdots (\mathbf{V}_1)_{\sigma_{N-1},\sigma_N} (\mathbf{V}_1)_{\sigma_N,\sigma_1} = \mathrm{Tr}\left(\mathbf{V}_1^N\right).$$

Voimme kirjoittaa $\mathbf{V}_1$:n Pauli-matriisin $\boldsymbol{\tau}^x$:n avulla muodossa $\mathbf{V}_1 = e^{K_1}(\mathbf{I} + e^{-2K_1}\boldsymbol{\tau}^x)$.

Seuraavaksi haluaisimme päästä käyttämään kaavaa IV.14. Siksi etsimme vakion K_1^* siten, että $e^{-2K_1} = \tanh(K_1^*)$.

Tehtävä IV.7.

(a) Osoita, että kaikilla $x > 0$ yhtälöllä $\tanh(y) = e^{-2x}$, $y \in \mathbb{R}$, on yksikäsitteinen ratkaisu. Merkitään tätä ratkaisua $f(x) = y$.

(b) Osoita, että $f(x) > 0$ kaikilla $x > 0$ ja että $x \mapsto f(x)$ on vähenevä ja että se on bijektio $(0, \infty)$:ltä itselleen.

(c) Osoita, että yhtälöllä $f(x) = x$, $x > 0$, on yksikäsitteinen ratkaisu ja ratkaise yhtälö.

Todistamme seuraavaksi eräitä identiteettejä liittyen eksponenttifunktioon ja hyperbolisiin funktioihin.

Lemma IV.24. *Kun $K \neq 0$, olkoon K^* s.e. $e^{-2K^*} = \tanh(K)$. Silloin $e^{-2K} = \tanh(K^*)$ ja $\sinh(2K)\sinh(2K^*) = 1$.*

Todistus. Määritelmän mukaan

$$e^{-2K^*} = \tanh(K) = \frac{1 - e^{-2K}}{1 + e^{-2K}},$$

jonka kirjoitamme edelleen muotoon $1 - e^{-2K} = e^{-2K^*}(1 + e^{-2K})$. Ratkaisemme

$$e^{-2K} = \frac{1 - e^{-2K^*}}{1 + e^{-2K^*}} = \tanh(K^*).$$

Olemme todistaneet ensimmäisen väitteen. Nyt kirjoitamme

$$\sinh(2K) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\tanh(K^*)} - \tanh(K^*)\right) = \frac{\cosh^2(K^*) - \sinh^2(K^*)}{2\sinh(K^*)\cosh(K^*)} = \frac{1}{\sinh(2K^*)},$$

mistä toinen väite seuraa. □

Tätä lemmaa ja huomiota (IV.14) käyttämällä voimme kirjoittaa

$$e^{K_1}(\mathbf{I} + e^{-2K_1}\boldsymbol{\tau}^x) = \sqrt{2\sinh(2K_1)}\exp(K_1^*\boldsymbol{\tau}^x).$$

Jätämme etutekijän sieventämisen tähän muotoon lukijalle.

Tarkastellaan nyt kaksiulotteisen mallin yhtä riviä, jonka spin-tilat ovat $\Sigma_I = \{(\sigma_i)_{i\in I}\}$, ja vektoriavaruutta V, joka määritellään kantavektorien $\underline{e}_{\underline{\sigma}}$, $\underline{\sigma} \in \Sigma_I$, avulla. Vastaavasti kuin yksiulotteisessa tapauksessa matriisi

$$(\mathbf{V}_1)_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}'} = \exp\left(K_1\sum_{m=1}^{M}\sigma_m\sigma'_m\right)$$

voidaan kirjoittaa muodossa

$$\mathbf{V}_1 = (2\sinh(2K_1))^{\frac{M}{2}}\ \exp\left(K_1^*\sum_{m=1}^{M}\boldsymbol{\tau}_m^x\right),$$

missä $\boldsymbol{\tau}_m^x$ on $\boldsymbol{\tau}^x$, joka operoi komponenttiin σ_m ja on siis, kun identifioimme kantavektorit $\underline{e}_{\underline{\sigma}} = \underline{e}_{\sigma_1} \otimes \underline{e}_{\sigma_2} \otimes \ldots \otimes \underline{e}_{\sigma_M}$, muotoa

$$\boldsymbol{\tau}_m^x = \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \otimes \ldots \otimes \mathbf{I} \otimes \boldsymbol{\tau}^x \otimes \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \otimes \ldots \otimes \mathbf{I},$$

missä $\mathbf{I} \in \mathbb{C}^{2\times 2}$ on identiteetti matriisi. Vastaavasti, jos $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{2\times 2}$, niin

$$\mathbf{A}_m := \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \otimes \ldots \otimes \mathbf{I} \otimes \mathbf{A} \otimes \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \otimes \ldots \otimes \mathbf{I} \tag{IV.16}$$

ja tämä lineaarikuvaus tulee määrättyä sen operoinnista kantavektoreille

$$\mathbf{A}_m\ \underline{e}_{\sigma_1} \otimes \underline{e}_{\sigma_2} \otimes \ldots \otimes \underline{e}_{\sigma_M} = \underline{e}_{\sigma_1} \otimes \ldots \otimes \underline{e}_{\sigma_{m-1}} \otimes \left(\mathbf{A}\ \underline{e}_{\sigma_m}\right) \otimes \underline{e}_{\sigma_{m+1}} \otimes \ldots \otimes \underline{e}_{\sigma_M}$$

Itse asiassa juuri tätä enempää emme tensorituloja tarvitsekaan: tarvitsimme niitä muodostaaksemme 2×2-matriiseista $2^M \times 2^M$-matriiseja. Käytämme notaatiota $\mathbf{A}_m$ vain Pauli-matriiseille. Alla tulemme kohtamaan operaattoreita, joita saamme Pauli-matriiseista, ja nämä operoivat samanaikaisesti useampaan tensorikomponenttiin.

Vastaavasti matriisit

$$(\mathbf{V}_2)_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}'} = \delta_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}'}\exp\left(K_2\sum_{m=1}^{M}\sigma_m\sigma_{m+1}\right), \qquad (\mathbf{V}_3)_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}'} = \delta_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}'}\exp\left(h\sum_{m=1}^{M}\sigma_m\right)$$

kirjoitetaan muotoon

$$\mathbf{V}_2 = \exp\left(K_2\sum_{m=1}^{M}\boldsymbol{\tau}_m^z\boldsymbol{\tau}_{m+1}^z\right), \qquad \mathbf{V}_3 = \exp\left(h\sum_{m=1}^{M}\boldsymbol{\tau}_m^z\right).$$

Matriisien $\mathbf{V}_2$ ja $\mathbf{V}_3$ lausumiseen matriisien $\boldsymbol{\tau}_m^z$ avulla käytämme Tehtävän IV.8 kohtaa (d): kaikki käyttämämme kantavektorit ovat $\boldsymbol{\tau}_m^z$ matriisien ominaisarvoja. Kaikkien matriisien $\mathbf{V}_k$ spinmatriisimuotoon kirjoittamisessa käytimme implisiittisesti Tehtävän IV.8 kohtaa (c).

Tehtävä IV.8. Olkoon $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $\underline{v} \in \mathbb{C}^n$ ja $\lambda \in \mathbb{C}$. Merkitään kommutaattoria $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$. Todista seuraavat väitteet.

(a) Pätee $[\mathbf{AB}, \mathbf{C}] = \mathbf{A}\,[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\,\mathbf{B}$.

(b) Jos $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$, niin $[\exp(\mathbf{A}), \mathbf{B}] = 0$.

(c) Jos $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$, niin $\exp(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \exp(\mathbf{A})\,\exp(\mathbf{B})$.

(d) Jos $\mathbf{A}\,\underline{v} = \lambda\,\underline{v}$, niin $\exp(\mathbf{A})\,\underline{v} = e^{\lambda}\,\underline{v}$.

(e) Jos $\mathbf{C}$ on kääntyvä ja $\mathbf{B} = \mathbf{C}^{-1}\,\mathbf{A}\,\mathbf{C}$, niin $\exp(\mathbf{B}) = \mathbf{C}^{-1}\,\exp(\mathbf{A})\,\mathbf{C}$.

Määrittelemme kaksiulotteisen Isingin mallin siirtomatriisin symmetrisenä matriisina

$$\mathbf{T} = (\mathbf{V}_2\,\mathbf{V}_3)^{1/2}\;\mathbf{V}_1\;(\mathbf{V}_2\,\mathbf{V}_3)^{1/2}. \tag{IV.17}$$

Huomautus IV.25. Tässä muotoa $\exp(\mathbf{A})$ olevan matriisin potenssit lasketaan $(\exp(\mathbf{A}))^t = \exp(t\mathbf{A})$, $t \in \mathbb{R}$.

Propositio IV.26. *Kaksiulotteisen Isingin mallin partitio funktio voidaan kirjoittaa muodossa*

$$Z = \mathrm{Tr}\left((\mathbf{V}_1\mathbf{V}_2\mathbf{V}_3)^N\right)$$

tai vaihtoehtoisesti muodossa

$$Z = \mathrm{Tr}\left((\mathbf{T})^N\right).$$

Todistus. Todistamme ensimmäisen muodon partitiofunktiolle suoralla laskulla. Toinen seuraa tästä järjestelemällä matriisi tuloa uudelleen ja huomaamalla, että $\mathbf{V_k} = (\mathbf{V_k})^{1/2}\,(\mathbf{V_k})^{1/2}$ ja että $(\mathbf{V_2})^{1/2}$ ja $(\mathbf{V_3})^{1/2}$ kommutoivat. Lisäksi käytämme matriisijäljen syklisyyttä, $\mathrm{Tr}(\mathbf{AB}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{BA})$.

Lasketaan ensin matriisitulo

$$\begin{aligned}(\mathbf{V}_1\mathbf{V}_2\mathbf{V}_3)_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}'} &= \sum_{\underline{\sigma}''}\sum_{\underline{\sigma}'''}\exp\left(K_1\sum_{m=1}^{M}\sigma_m\sigma''_m\right)\delta_{\underline{\sigma}'',\underline{\sigma}'''}\exp\left(K_2\sum_{m=1}^{M}\sigma''_m\sigma''_{m+1}\right)\\ &\qquad \delta_{\underline{\sigma}''',\underline{\sigma}'}\exp\left(h\sum_{m=1}^{M}\sigma'''_m\right)\\ &= \exp\left(K_1\sum_{m=1}^{M}\sigma_m\sigma'_m + K_2\sum_{m=1}^{M}\sigma'_m\sigma'_{m+1} + h\sum_{m=1}^{M}\sigma'_m\right).\end{aligned}$$

Kertomalla tätä matriisielementtiä N kertaa siten, että indeksit käyvät läpi arvot $\underline{\sigma} = (\sigma_{(m,n)})_{m\in I}$ ja $\underline{\sigma}' = (\sigma_{(m,n+1)})_{m\in I}$ missä $n \in J$, saadaan tulosta Isingin mallin Boltzmannin paino $\exp(-\beta H(\,(\sigma_{(i,j)})_{(i,j)\in L}))$. Niinpä helposti näemme, että väite $Z = \mathrm{Tr}\left((\mathbf{V}_1\mathbf{V}_2\mathbf{V}_3)^N\right)$ seuraa tästä. Jokaisen lukijan tulisi nyt tarkistaa, että ymmärtää tämän vaiheen. □

Loppuosa tästä luvusta tähtää nyt siirtomatriisin $\mathbf{T}$ muokkaamiseen muotoon, josta voimme laskea fysikaalisesti kiinnostavia suureita. Tällaiseksi päämääräksi on hyvä ottaa vaikkapa vapaan energian tiheyden laskeminen, joka partitiofunktiosta ja siirtomatriin avulla voidaan kirjoittaa muodossa

$$f_{N,M}(K_1, K_2, h) = -\frac{1}{\beta\,\#L}\log\mathrm{Tr}(\mathbf{T}^N).$$

Tehtävä on vaikea, koska matriisin $\mathbf{T} \in \mathbb{C}^{2^M\times 2^M}$ koko riippuu M:stä, mutta melko ihmeellisesti pystymme ratkaisemaan tehtävän. Kuten johdannossa totesimme, yksi syy miksi Isingin malli on niin kuuluisa on se, että kaksiulotteinen Isingin malli on sekä epätriviaali (esim. sillä faasitransitio) että eksaktisti ratkeava (seuraavissa luvuissa olevien algebrallisten manipulaatioiden mielessä).

Tehtävä IV.9. Olkoon $\mathbf{T} : \mathbb{C}^{2^M} \to \mathbb{C}^{2^M}$ kaksiulotteisen Isingin mallin symmetrisoitu siirtomatriisi $\mathbf{T} = (\mathbf{V}_2\,\mathbf{V}_3)^{\frac{1}{2}}\,\mathbf{V}_1\,(\mathbf{V}_2\,\mathbf{V}_3)^{\frac{1}{2}}$. Osoita, että kun $1 \le y_1 \le y_2 \le \ldots \le y_n \le N$ ja $x_k \in [\![1, M]\!]$,

$$\mathsf{E}\left[\prod_{j=1}^{n} \sigma_{(x_j,y_j)}\right] = \frac{\mathrm{Tr}\left(\mathbf{T}^{y_1}\,\boldsymbol{\tau}^z_{x_1}\,\mathbf{T}^{y_2-y_1}\,\boldsymbol{\tau}^z_{x_2}\,\mathbf{T}^{y_3-y_2}\,\boldsymbol{\tau}^z_{x_3}\,\ldots\,\boldsymbol{\tau}^z_{x_{n-1}}\,\mathbf{T}^{y_n-y_{n-1}}\,\boldsymbol{\tau}^z_{x_n}\,\mathbf{T}^{N-y_n}\right)}{\mathrm{Tr}\left(\mathbf{T}^N\right)}.$$

2.2. Siirtomatriisi fermionien avulla

Tässä luvussa kerromme, miten useammalla kannanvaihdolla saamme diagonalisoitua matriisin $\mathbf{T}$. Laskut pitäisivät olla helposti seurattavia, mutta hankaluutena on, että argumentti etenee useammassa vaiheessa. Koitamme kuitenkin pitää selvänä esim. mitä kantaa käytämme kulloikin. Tässä mielessä on aina mahdollista palata alkuperäiseen kantaan, jolla on yhteys spinkonfiguraatioihin.

2.2.1. *Kannanvaihto $\boldsymbol{\tau}^x$:n ominaisvektoreihin*

Koska matriisit $\mathbf{V}_k$ ovat muotoa $\exp(\mathbf{A})$, missä $\mathbf{A}$ on lineaarinen tai kvadraattisia matriiseissa $\boldsymbol{\tau}^\alpha$, $\alpha = x, y, z$, haluamme säilyttää tämän polynomien alhaisen asteen matriiseihin $\boldsymbol{\tau}^+$ ja $\boldsymbol{\tau}^-$ siirryttäessä. Kirjoitamme

$$\boldsymbol{\tau}^x = \boldsymbol{\tau}^+ + \boldsymbol{\tau}^-, \qquad \boldsymbol{\tau}^z = \boldsymbol{\tau}^+\boldsymbol{\tau}^- - \boldsymbol{\tau}^-\boldsymbol{\tau}^+ = 2\boldsymbol{\tau}^+\boldsymbol{\tau}^- - 1. \tag{IV.18}$$

Koska $\boldsymbol{\tau}^x$ on lineaarinen ja $\boldsymbol{\tau}^z$ on kvadraattinen matriiseissa $\boldsymbol{\tau}^+$ ja $\boldsymbol{\tau}^-$, on järkevää vaihtaa kanta siten, että $\mathbf{V}_2$ tulee ilmaistua $\boldsymbol{\tau}^x$:n avulla.

Tehdään kannanvaihto $\mathbb{C}^2$:ssa kantaan $\underline{f}_1$, $\underline{f}_0$, missä

$$\underline{f}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\underline{e}_1 - \underline{e}_0), \qquad \underline{f}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\underline{e}_1 + \underline{e}_0),$$

jota vastaa kannanvaihtomatriisi on

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Tässä kannanvaihdossa matriisit $\boldsymbol{\tau}^i$ muuntuvat

$$\mathbf{U}^\top\,\boldsymbol{\tau}^x\,\mathbf{U} = -\boldsymbol{\tau}^z, \qquad \mathbf{U}^\top\,\boldsymbol{\tau}^z\,\mathbf{U} = \boldsymbol{\tau}^x.$$

Kannanvaihto muuttaa vektoriavaruuden $\mathbb{C}^{2^M} = (\mathbb{C}^2)^{\otimes M}$ jokaisessa tensorikomponentissa kantaa, mutta $\boldsymbol{\tau}^i_m$ operoi edelleen vain m:teen tensorikomponenttiin. Uudessa kannassa

$$\mathbf{V}_1 = (2\sinh(2K_1))^{\frac{M}{2}}\exp\left(-K_1^*\sum_{m=1}^{M}\boldsymbol{\tau}^z_m\right)$$

$$\mathbf{V}_2 = \exp\left(K_2\sum_{m=1}^{M}\boldsymbol{\tau}^x_m\boldsymbol{\tau}^x_{m+1}\right)$$

$$\mathbf{V}_3 = \exp\left(h\sum_{m=1}^{M}\boldsymbol{\tau}^x_m\right).$$

Huomautus IV.27. Käytämme edelleen merkintää $\boldsymbol{\tau}^i_m$ Pauli-matriiselle. Kantamme on nyt $\underline{f}_{\underline{n}} = \underline{f}_{n_1} \otimes \ldots \otimes \underline{f}_{n_M}$ ja $\boldsymbol{\tau}^i_m$ operoi siis tämän kantavektorin m:teen tensorikonponenttiin .

2.2.2. *Siirtomatriisi matriisien $\boldsymbol{\tau}^\pm$ avulla*

Tässä vaiheessa siirrymme matriiseista $\boldsymbol{\tau}^x$ ja $\boldsymbol{\tau}^z$ kaavojen (IV.18) avulla

$$\mathbf{V}_1 = (2\sinh(2K_1))^{\frac{M}{2}} \exp\left(2K_1^* \sum_{m=1}^{M} (\boldsymbol{\tau}^+_m \boldsymbol{\tau}^-_m - (1/2)\,\mathbf{I})\right)$$
$$\mathbf{V}_2 = \exp\left(K_2 \sum_{m=1}^{M} (\boldsymbol{\tau}^+_m + \boldsymbol{\tau}^-_m)(\boldsymbol{\tau}^+_{m+1} + \boldsymbol{\tau}^-_{m+1})\right)$$
$$\mathbf{V}_3 = \exp\left(h \sum_{m=1}^{M} (\boldsymbol{\tau}^+_m + \boldsymbol{\tau}^-_m)\right)$$

Huomaamme erityisesti, että $\mathbf{V}_1$ ja $\mathbf{V}_2$ ovat matriisien $\boldsymbol{\tau}^+_m$ ja $\boldsymbol{\tau}^-_m$ eksponentuja kvadraattisia lausekeita, mutta $\mathbf{V}_3$ on eksponentti lineaarisesta lausekkeesta. Tällä tulee olemaan suuri merkitys. Voimme diagonalisoida $\mathbf{V}_1$:n ja $\mathbf{V}_2$:n yhtäaikaisesti, mutta emme enää $\mathbf{V}_3$:sta, vrt. Lemma IV.29. Joudumme pian asettamaan $h = 0$ jolloin $\mathbf{V}_3$:sta tulee identiteettimatriisi.

2.2.3. *Fermioniset lasku- ja nosto-operaattorit $\mathbf{C}_m$, $\mathbf{C}^\dagger_m$*

Koska matriisit $\boldsymbol{\tau}^\pm_m$ toteuttavat vain osittaiset fermionisten operaattorien antikommutaatiorelaatiot eli täsmälleen seuraavaa muotoa olevat relaatiot

$$[\boldsymbol{\tau}^\pm_m, \boldsymbol{\tau}^\pm_l] = 0, \qquad [\boldsymbol{\tau}^+_m, \boldsymbol{\tau}^-_m]_+ = \mathbf{I}, \qquad [\boldsymbol{\tau}^+_m, \boldsymbol{\tau}^+_m]_+ = 0 = [\boldsymbol{\tau}^-_m, \boldsymbol{\tau}^-_m]_+,$$

missä $m \neq l$, haluamme määritellä uuden kokoelman operaattoreita, jotka toteuttavat kaikki fermionisten operaattorien relaatiot. Vaikkapa seuraavan tehtävän johtopäätöstä käyttäen huomaamme, että täysin bosonisia emme näistä operaattoreista voi tehdä.

Tehtävä IV.10. Olkoon $A, A^\dagger$ lineaarikuvauksia epätriviaalilla vektoriavaruudella V, jotka toteuttavat

$$A\,A^\dagger - A^\dagger\,A = \mathrm{id}_V,$$

missä id_V on avaruuden V identiteettikuvaus. Osoita, että V ei voi olla äärellisdimensioinen.

Vihje. Yritä käyttää sopivaa matriisien piirrettä, joka on $A\,A^\dagger$:lle ja $A^\dagger\,A$:lle sama.

Määritellään fermioniset lasku- ja nosto-operaattorit

$$\mathbf{C}_m = \left(\prod_{j=1}^{m-1} (-\boldsymbol{\tau}^z_j)\right) \boldsymbol{\tau}^-_m, \qquad \mathbf{C}^\dagger_m = \left(\prod_{j=1}^{m-1} (-\boldsymbol{\tau}^z_j)\right) \boldsymbol{\tau}^+_m \qquad \text{(IV.19)}$$

ja nk. numero-operaattori

$$\mathbf{N}_m = \mathbf{C}^\dagger_m\,\mathbf{C}_m.$$

Näemme helposti, koska matriisit $\boldsymbol{\tau}^z_j$, $\boldsymbol{\tau}^\pm_j$ kommutoivat pareittain kunhan ideksit j ovat eri, että $\mathbf{N}_m = \boldsymbol{\tau}^+_m \boldsymbol{\tau}^-_m$.

Tarkistamme alempana, että $\mathbf{C}_m, \mathbf{C}_m^\dagger$, $m \in [\![1, M]\!]$, toteuttavat kanoniset antikommutaatiorelaatiot. Jo ennen sitä voimme huomata, että vektori $\underline{f}_{(0,0,\ldots,0)}$ toteuttaa *vakuumiominaisuuden*: $\underline{f}_{(0,0,\ldots,0)} \neq \underline{0}$ ja kaikilla $m \in [\![1, M]\!]$

$$\mathbf{C}_m \, \underline{f}_{(0,0,\ldots,0)} = \underline{0}.$$

Lisäksi huomaamme, että koko käyttämämme kannan saamme luomisoperaattoreilla operoimalla

$$\underline{f}_{(n_1,n_2,\ldots,n_M)} = (\mathbf{C}_1^\dagger)^{n_1}(\mathbf{C}_2^\dagger)^{n_2}\ldots(\mathbf{C}_M^\dagger)^{n_M}\underline{f}_{(0,0,\ldots,0)},$$

missä $n_j \in \{0,1\}$ kaikilla $j \in [\![1, M]\!]$. Kantavektorit ovat numero-operaattorin ominaisvektoreita: $\mathbf{N}_m \underline{f}_{(n_1,n_2,\ldots,n_M)} = n_m \, \underline{f}_{(n_1,n_2,\ldots,n_M)}$. Nämä helpot yksityiskohdat jätämme lukijalle.

Lemma IV.28. *Kun $\mathbf{C}_m$ ja $\mathbf{C}_m^\dagger$ määritellään kaavoilla* (IV.19)*, niin*

$$[\mathbf{C}_m, \mathbf{C}_{m'}^\dagger]_+ = \delta_{m,m'}\mathbf{I}, \qquad [\mathbf{C}_m, \mathbf{C}_{m'}]_+ = 0, \qquad [\mathbf{C}_m^\dagger, \mathbf{C}_{m'}^\dagger]_+ = 0.$$

Kaavaa (IV.19) *vastaava muunnos $\mathbf{C}_m$:stä ja $\mathbf{C}_m^\dagger$:stä matriiseihin $\boldsymbol{\tau}_m^\pm$ on*

$$\boldsymbol{\tau}_m^- = \left(\prod_{j=1}^{m-1}(-(2\mathbf{N}_j - \mathbf{I}))\right)\mathbf{C}_m, \qquad \boldsymbol{\tau}_m^+ = \left(\prod_{j=1}^{m-1}(-(2\mathbf{N}_j - \mathbf{I}))\right)\mathbf{C}_m^\dagger. \tag{IV.20}$$

Todistus. Käytämme todistuksessa Tehtävää IV.2. Kun $S \subset [\![1, M]\!]$, merkitsemme $\underline{f}_S = \underline{f}_{(n_i)_{i\in[\![1,M]\!]}}$ missä $n_i = \mathbb{1}_{i\in S}$. Tällöin vektoreiden $\underline{f}_S$, $S \subset [\![1, M]\!]$, muodostamassa kannassa $\mathbf{C}_m$, $\mathbf{C}_m^\dagger$, $m \in [\![1, M]\!]$, operoivat juuri niin kuin Tehtävän IV.2 lineaarikuvaukset. Kanoniset antikommutaatiorelaatiot seuraavat kyseisestä tehtävästä.

Koska huosimme yllä, että $\mathbf{N}_m = \mathbf{C}_m^\dagger \mathbf{C}_m = \boldsymbol{\tau}_m^+ \boldsymbol{\tau}_m^-$ ja siksi $2\mathbf{N}_m - \mathbf{I} = \boldsymbol{\tau}_m^z$, seuraa käänteismuunnos (IV.20) helposti. □

Kirjoitamme nyt matriisit $\mathbf{V}_1$ ja $\mathbf{V}_2$ matriisien $\mathbf{C}_m$ ja $\mathbf{C}_m^\dagger$, $m = 1, 2, \ldots, M$, avulla.

Lemma IV.29. *Matriiseille $\boldsymbol{\tau}_m^\pm$, $\mathbf{C}_m$, $\mathbf{C}_m^\dagger$, $m = [\![1, M]\!]$, pätevät seuraavat kaavat*

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\tau}_m^+ \boldsymbol{\tau}_{m+1}^- &= \mathbf{C}_m^\dagger \mathbf{C}_{m+1}, & \boldsymbol{\tau}_m^- \boldsymbol{\tau}_{m+1}^+ &= -\mathbf{C}_m \mathbf{C}_{m+1}^\dagger, \\
\boldsymbol{\tau}_m^+ \boldsymbol{\tau}_{m+1}^+ &= \mathbf{C}_m^\dagger \mathbf{C}_{m+1}^\dagger, & \boldsymbol{\tau}_m^- \boldsymbol{\tau}_{m+1}^- &= -\mathbf{C}_m \mathbf{C}_{m+1},
\end{aligned}$$

missä $\mathbf{C}_{M+1} = \mathbf{P}\,\mathbf{C}_1$ ja $\mathbf{C}_{M+1}^\dagger = \mathbf{P}\,\mathbf{C}_1^\dagger$ ja $\mathbf{P} = \prod_{j=1}^M(-(2\mathbf{N}_j - \mathbf{I}))$.

Todistus. Kaikki identiteetit perustuvat havaintoihin $(\boldsymbol{\tau}^z)^2 = \mathbf{I}$, $\boldsymbol{\tau}^- \boldsymbol{\tau}_z = \boldsymbol{\tau}^-$ ja $\boldsymbol{\tau}^+ \boldsymbol{\tau}_z = -\boldsymbol{\tau}^+$.

Esimerkiksi viimeisen kaavan saamme laskemalla

$$-\mathbf{C}_m \mathbf{C}_{m+1} = \left(\prod_{j=1}^{m-1}(-\boldsymbol{\tau}_j^z)^2\right)\underbrace{\boldsymbol{\tau}_m^- \boldsymbol{\tau}_m^z}_{=\boldsymbol{\tau}_m^-}\boldsymbol{\tau}_{m+1}^- = \boldsymbol{\tau}_m^- \boldsymbol{\tau}_{m+1}^-.$$

Muut kaavat saadaan vastaavilla suorilla laskuilla. □

Käyttämällä näitä kaavoja saamme

$$\mathbf{V}_1 = (2\sinh(2K_1))^{\frac{M}{2}} \exp\left(-2K_1^* \sum_{m=1}^{M} (\mathbf{C}_m^\dagger \mathbf{C}_m - (1/2)\,\mathbf{I})\right) \tag{IV.21}$$

$$\mathbf{V}_2 = \exp\left(K_2 \sum_{m=1}^{M} (\mathbf{C}_m^\dagger - \mathbf{C}_m)(\mathbf{C}_{m+1}^\dagger + \mathbf{C}_{m+1})\right) \tag{IV.22}$$

Valitettavasti $\mathbf{V}_3$ ei pysy yksinkertaisena tässä muunnoksessa. Niinpä *asetamme* $h = 0$ *ja tarkastelemme Isingin mallia ilman ulkoista magneettikenttää* luvun loppuun saakka.