Вычисление тензорных свёрток диаграмм Фейнмана в многозарядных теоретико-полевых моделях

К. Б. Варнашев

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

k.varnashev@mail.ru

***Аннотация*. На примере трёхзарядной теоретико-полевой модели, описывающей антиферромагнитные фазовые переходы в кристаллах со сложными видами упорядочения, обсуждается алгоритм вычисления тензорных коэффициентов, соответствующих диаграммам Фейнмана в рамках перенормированной теории возмущения. Тензорный коэффициент, как результат свёртки тензоров, ассоциированных с различными типами взаимодействия в кристалле, представляется в виде полинома по *N*, размерности *N*-компонентного поля параметра порядка, при различных комбинациях инвариантных зарядов, соответствующих вершинам диаграмм Фейнмана. Описанный алгоритм универсален, т. е. допускает вычисление тензорных свёрток диаграмм на основе стандартных алгоритмических языков программирования типа PASCAL или FORTRAN.**

Ключевые слова: критические явления; поле параметра порядка; диаграммы Фейнмана, тензорные свёртки

I. Введение: критические явления. Флуктуации параметра порядка

В данном разделе мы вкратце поясним, зачем при исследовании критических свойств веществ самой различной природы приходится применять методы квантовой теории поля такие, например, как диаграммные разложения и перенормировка.

Согласно теории, описывающей критические явления в разного рода материалах и моделях физических систем, сингулярное поведение ряда термодинамических функций таких, например, как теплоёмкости или магнитной восприимчивости, является следствием появления в критической точке (точке фазового перехода) сильных взаимодействующих между собой флуктуаций параметра порядка (ПП). Роль ПП, N-компонентного вещественного или комплексного поля, может играть, например, намагниченность в магнитных веществах, вектор спонтанной поляризации в сегнетоэлектриках или в случае сверхпроводников – комплексное векторное поле ψ сверхпроводящего конденсата.

Хорошо известно, что флуктуации ПП простираются на большие расстояния и медленно затухают, так что в точке фазового перехода, по сути, мы имеет дело с сильно нелинейными процессами. Следовательно, основная задача теории критических явлений заключается в учёте сильно развитых термодинамических флуктуаций, ответственных за аномальное поведение термодинамических функций, для получения корректных качественных и количественных предсказаний относительно критического поведения реальных веществ. Естественным образом учесть влияние флуктуаций на свойства фазовых переходов в критической области позволяет хорошо разработанный метод ренормализационной группы [1, 2], основу которого составляют диаграммные разложения и перенормировка параметров модели в рамках квантово-полевого подхода. Действительно, акты многоступенчатых промежуточных процессов рассеяния флуктуонов сколь угодно высокой кратности и сколь угодно различных типов их движения между столкновениями, а также всё возрастающая нелинейность самой среды, являющейся источником рассеяния флуктуонов друг на друге, при приближении к критической точке определяются ростом констант взаимодействия в модельном (флуктуационном) гамильтониане Ландау–Вильсона. В точке фазового перехода нелинейные свойства системы будут определяться уже не затравочными («голыми») константами взаимодействия исходного гамильтониана, а некоторыми эффективными («одетыми»), учитывающими влияние флуктуаций, зарядами. Переход от затравочных параметров функционала Ландау–Вильсона к его эффективным аналогам посредством перенормировки, а также представление констант ренормировки в виде бесконечных диаграммных рядов подробно был описан в предыдущей нашей работе [3]. Целю данного исследования является описание одного существенного фрагмента вычислений, определяющего вклад отдельно взятой диаграммы Фейнмана в общее разложение для конкретной величины. Речь пойдёт о вычислении свёрток симметризованных тензоров, ассоциированных с различными типами взаимодействия в рассматриваемой модели.

II. Модельный гамильтониан

Рассмотрим обобщённую $2N$-компонентную теоретико-полевую модель Ландау–Вильсона с тремя константами связи (зарядами), соответствующими трём различным типам взаимодействия в кристалле (изотропному, кубическому и тетрагональному), описывающую критические свойства фазовых переходов в некоторых антиферромагнетиках, элементарная ячейка которых при $T = T_c$ увеличивается в одном или нескольких направлениях [4–6]:

$$H = \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2N} \left(m_0^2 \varphi_i^2 + \vec{\nabla}\varphi_i \vec{\nabla}\varphi_i \right) + \frac{u_0}{4!} \left(\sum_{i=1}^{2N} \varphi_i^2 \right)^2 + \frac{v_0}{4!} \sum_{i=1}^{2N} \varphi_i^4 + 2 \frac{z_0}{4!} \sum_{i=1}^{2N} \varphi_{2i-1}^2 \varphi_{2i}^2 \right\}. \quad (1)$$

Здесь D – пространственная размерность системы, u_0, v_0 и z_0 суть затравочные константы связи, а квадрат голой массы m_0^2 пропорционален $T - T_c^{(0)}$, где $T_c^{(0)}$ – температура фазового перехода в приближении среднего поля. Поле φ_i – вещественное векторное поле флуктуаций ПП, которое можно рассматривать как объект, состоящий из двух, чётной и нечётной, компонент, каждая из которых сама является N-мерным вектором.

Модельный гамильтониан (1) описывает влияние критических флуктуаций на фазовые переходы множества анизотропных систем [7, 8]. Так случаю $N = 2$ в (1) отвечают антиферромагнитные фазовые переходы в таких веществах, как $TbAu_2$ и DyC_2, структурный переход в кристалле NbO_2, а также фазовые переходы в геликоидальных магнетиках (Tb, Dy и Ho) и магнетиках с синусоидальной спиновой структурой. К тому же классу универсальности относятся сверхпроводники с нетривиальными видами спаривания (тяжело-фермионные сверхпроводники UPt_3, Ube_{13} и, по-видимому, высокотемпературные сверхпроводники), полностью фрустрированные джозефсоновские решётки при $T = 0$. Случаю $N = 3$ отвечают антиферромагнитные фазовые переходы в кристаллах K_2IrCl_6, TbD_2, MnS_2 и в неодиме.

III. Симметризованные тензоры и константы перенормировки

Перепишем гамильтониан (1) в эквивалентной форме, позволяющей ввести в рассмотрение три симметризованных тензора G_1, G_2 и G_3:

$$H = \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} \left(m_0^2 \varphi_i^\alpha \varphi_i^\alpha + \partial_\mu \varphi_i^\alpha \partial_\mu \varphi_i^\alpha \right) + \frac{1}{4!} \left(u_0 G_{1\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} + v_0 G_{2\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} + 2 z_0 G_{3\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} \right) \varphi_i^\alpha \varphi_j^\beta \varphi_k^\mu \varphi_l^\nu \right\}, \quad (2)$$

ассоциированных с тремя видами взаимодействия в нашей задаче. Определим тензоры:

$$G_{1\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} = \frac{1}{3} \left(\delta^{\alpha\beta} \delta^{\mu\nu} \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta^{\alpha\mu} \delta^{\beta\nu} \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta^{\alpha\nu} \delta^{\beta\mu} \delta_{il} \delta_{kj} \right),$$

соответствующий изотропному взаимодействию,

$$G_{2\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} = \delta^{\alpha\beta} \delta^{\alpha\mu} \delta^{\alpha\nu} \delta_{ij} \delta_{ik} \delta_{ij} \delta_{il},$$

соответствующий взаимодействию кубического типа и тензор

$$G_{3\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} = \frac{1}{3} \left(\delta^{1\alpha} \delta^{1\beta} \delta^{2\mu} \delta^{2\nu} + \delta^{1\alpha} \delta^{1\mu} \delta^{2\beta} \delta^{2\nu} + \delta^{1\alpha} \delta^{1\nu} \delta^{2\beta} \delta^{2\mu} + \delta^{2\alpha} \delta^{2\beta} \delta^{1\mu} \delta^{1\nu} + \delta^{2\alpha} \delta^{2\mu} \delta^{1\beta} \delta^{1\nu} + \delta^{2\alpha} \delta^{2\nu} \delta^{1\beta} \delta^{1\mu} \right) \delta_{ij} \delta_{ik} \delta_{il},$$

соответствующий взаимодействию тетрагонального типа. Греческие индексы $\{\alpha, \beta, \mu, \nu\}$=1, 2 пробегают чётные и нечётные компоненты, а латинские $\{i, j, k, l\}$=1, 2, … , N – сами поля.

Все затравочные параметры модели (заряды, масса и поле ПП) должны быть перенормированы путём введения в затравочный гамильтониан (2) констант ренормировок Z_i по правилу

$$u_0 = u\mu^\varepsilon Z_u, \quad v_0 = v\mu^\varepsilon Z_v, \quad z_0 = z\mu^\varepsilon Z_z, \quad m_0^2 = m^2 Z_{m^2}, \quad \varphi_0 = \varphi Z_\varphi,$$

так что ренормированный гамильтониан принимает вид:

$$H^R = \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} \left(m^2 Z_{m^2} Z_\varphi^2 \varphi_i^\alpha \varphi_i^\alpha + Z_\varphi^2 \partial_\mu \varphi_i^\alpha \partial_\mu \varphi_i^\alpha \right) + \frac{1}{4!} \left(u\mu^\varepsilon Z_u Z_\varphi^4 G_{1\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} + v\mu^\varepsilon Z_v Z_\varphi^4 G_{2\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} + 2z\mu^\varepsilon Z_z Z_\varphi^4 G_{3\,ijkl}^{\alpha\beta\mu\nu} \right) \varphi_i^\alpha \varphi_j^\beta \varphi_k^\mu \varphi_l^\nu \right\}. \quad (3)$$

Здесь μ – произвольный массовый параметр (масштабный множитель), обезразмеривающий константы взаимодействия, $\varepsilon = 4 - D$ – отклонение от четырёхмерности пространства (в случае трёхмерных кристаллов $\varepsilon = 1$). Сами константы ренормировки Z_i представляют собой бесконечные диаграммные ряды

$$Z_i(I; u, v, z) = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} c_i(I; u, v, z),$$

в которых каждая диаграмма Фейнмана содержит одетые линии и вершины, т. е. учитывает флуктуации (I обозначает значение интеграла, вычисленного для конкретной диаграммы). Вклад каждой диаграммы учитывается отдельно, затем результаты суммируются в рамках данного конкретного приближения (L-петлевого приближения) перенормированной теории возмущения.

IV. Алгоритм вычисления тензорных свёрток. Численные результаты

Как известно, вклад каждого фейнмановского графа в константы ренормировки Z_i представляет собой произведение трёх множителей: комбинаторного (симметрийного) коэффициента, результата тензорной свёртки и значение интеграла, ассоциированного с данной диаграммой. Комбинаторные множители и значения интегралов, вычисленные в рамках ε-разложения или непосредственно в пространстве фиксированной размерности ($D = 3$ или $D = 2$), известны сегодня вплоть до шестипетлевого приближения [9,10], в то время как вычисление тензорных свёрток вершинных и массовых диаграмм каждый раз представляют собой актуальную задачу в зависимости от выбранной модели, включающей в себя те или иные типы взаимодействия. Поскольку в трёхпетлевом и выше порядке теории возмущения мы имеем дело с достаточно большим количеством диаграмм (в шестипетлевом приближении их порядка 1000!), для вычисления тензорных факторов мы разработали пакет прикладных программ, написанных на стандартном алгоритмическом языке *PASCAL*. Ниже мы приводим наш алгоритм вычисления тензорных свёрток вершинных диаграмм, который опирается на два естественных предположения:

- Алгебра тензорных свёрток замкнута, т.е. каждый моном $G_{i1}*\ldots*G_{i\ l+1}$, дающий вклад в вершинную функцию, является линейной комбинацией базисных тензоров G_1, G_2 и G_3. Именно,

$$G_{i1}*\ldots*G_{i\ l+1} = a(N)\,G_1 + b(N)\,G_2 + c(N)\,G_3. \quad (4)$$

- Зависимость коэффициентов $a(N)$, $b(N)$ и $c(N)$ от числа N компонент ПП носит полиномиальный характер. Степень полиномов не превосходит числа L петель фейнмановского графа.

Первое условие означает, что в нашей модели не появится нового взаимодействия. Второе предположение становится очевидным после анализа конкретного вида тензоров G_i.

Поскольку полином степени l полностью определяется своими значениями в $l+1$ различных точках, достаточно вычислить свёртки тензоров, последовательно полагая $N = 2, 3, \ldots, l+2$. Мы начинаем с $N = 2$, так как при $N = 1$ между тензорами G_i имеется линейная зависимость. Для определения трёх неизвестных коэффициентов $a(N)$, $b(N)$ и $c(N)$, необходимо сравнить обе части выражения (4), присваивая мультииндексу $\begin{pmatrix}\alpha\beta\mu\nu\\ ijkl\end{pmatrix}$ значения $\begin{pmatrix}1122\\1122\end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix}1111\\1111\end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix}1212\\1111\end{pmatrix}$. Это даёт невырожденную систему линейных уравнений, чья 3x3-матрица не зависит от N. Из этой системы уравнений находятся коэффициенты разложения (4). Аналогичную процедуру можно применить и к вычислению массовых диаграмм. Ниже мы представляем, в качестве примера, результаты расчётов двухпетлевых вкладов в константы ренормировки Z_i, учитывающие все три упомянутых выше множителя для каждого конкретного фейнмановского графа.

Диаграмма Фейнмана	*Симметрийные множители и тензорные коэффициенты*	*Значение интеграла*

- <u>Однопетлевое приближение ($L = 1$)</u>

1.0 ($D = 3$)
1/*ε* ($D = 4 - \varepsilon$)

Вклад в $Z_u^{-1}\{Z_u\}$:

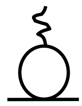
$$\mp 1\begin{Bmatrix}\frac{3}{2}\end{Bmatrix}\left[\frac{2(N+4)}{9}u_0 + \frac{2}{3}v_0 + \frac{2}{9}z_0\right],$$

Вклад в $Z_v^{-1}\{Z_v\}$:

$$\mp 1\begin{Bmatrix}\frac{3}{2}\end{Bmatrix}\left[\frac{4}{3}u_0 + v_0 + \frac{1}{9}\frac{z_0^2}{v_0}\right],$$

Вклад в $Z_z^{-1}\{Z_z\}$:

$$\mp 1\begin{Bmatrix}\frac{3}{2}\end{Bmatrix}\left[\frac{4}{3}u_0 + \frac{2}{3}v_0 + \frac{4}{9}z_0\right].$$

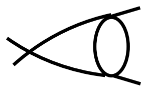


1.0 ($D = 3$)
1/*ε* ($D = 4 - \varepsilon$)

Вклад в $Z_{\varphi^2}^{-1}\{Z_{\varphi^2}\}$:

$$\mp 1\begin{Bmatrix}\frac{1}{2}\end{Bmatrix}\left[\frac{2(N+1)}{3}u_0 + v_0 + \frac{1}{3}z_0\right].$$

- <u>Двухпетлевое приближение ($L = 2$)</u>



0.6666666667 ($D = 3$)
– (1– *ε*)/2*ε*² ($D = 4 - \varepsilon$)

Вклад в $Z_u^{-1}\{Z_u\}$:

$$\pm 4\{3\}\left[\frac{2(5N+11)}{27}u_0^2 + \frac{4}{3}u_0v_0 + \frac{4}{9}u_0z_0 + \frac{1}{3}v_0^2 + \frac{1}{9}z_0^2\right],$$

Вклад в $Z_v^{-1}\{Z_v\}$:

$$\pm 4\{3\}\left[\frac{2(N+7)}{9}u_0^2 + \frac{8}{3}u_0v_0 + \frac{2}{9}\frac{u_0z_0^2}{v_0} + \frac{2}{9}u_0z_0 + v_0^2 + \frac{2}{27}\frac{z_0^3}{v_0} + \frac{1}{9}z_0^2\right],$$

Вклад в $Z_z^{-1}\{Z_z\}$:

$$\pm 4\{3\}\left[\frac{2(N+7)}{9}u_0^2 + 2u_0v_0 + \frac{10}{9}u_0z_0 + \frac{1}{3}v_0^2 + \frac{2}{3}v_0z_0 + \frac{5}{27}z_0^2\right].$$

1.0 ($D = 3$)
– 1/*ε*² ($D = 4 - \varepsilon$)

Вклад в $Z_u^{-1}\{Z_u\}$:

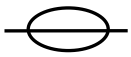
$$\pm 1\begin{Bmatrix}\frac{3}{4}\end{Bmatrix}\left[\frac{4(N^2+3N+5)}{27}u_0^2 + \frac{2(N+2)}{3}u_0v_0 + \frac{2(N+2)}{9}u_0z_0 + v_0^2 + \frac{2}{3}v_0z_0 + \frac{1}{9}z_0^2\right],$$

Вклад в $Z_v^{-1}\;\{\,Z_v\,\}$:

$$\pm 1\left\{\frac{3}{4}\right\}\left[\frac{4}{3}u_0^2+2u_0v_0+\frac{2}{9}\frac{u_0z_0^2}{v_0}+v_0^2+\frac{1}{3}z_0^2\right],$$

Вклад в $Z_z^{-1}\;\{\,Z_z\,\}$:

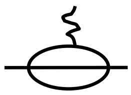
$$\pm 1\left\{\frac{3}{4}\right\}\left[\frac{4}{3}u_0^2+\frac{4}{3}u_0v_0+\frac{8}{9}u_0z_0+v_0^2+\frac{1}{3}z_0^2\right].$$



0.0740740741 (D = 3)
– 1/4*ε* ($D = 4 - \varepsilon$)

Вклад в $Z_\varphi^{-1}\;\{\,Z_\varphi\,\}$:

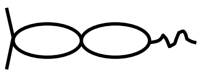
$$\frac{2}{3}\left\{\frac{1}{6}\right\}\left[\frac{2(N+1)}{3}u_0^2+2u_0v_0 +\frac{2}{3}u_0z_0+v_0^2+\frac{1}{3}z_0^2\right],$$



0.6666666667 (D = 3)
– (1– *ε*)/2*ε*^{2} ($D = 4 - \varepsilon$)

Вклад в $Z_{\varphi^2}^{-1}\;\{\,Z_{\varphi^2}\,\}$:

$$\pm 2\left\{\frac{3}{6}\right\}\left[\frac{2(N+1)}{3}u_0^2+2u_0v_0 +\frac{2}{3}u_0z_0+v_0^2+\frac{1}{3}z_0^2\right],$$



1.0 (D = 3)
– 1/*ε*^{2} ($D = 4 - \varepsilon$)

Вклад в $Z_{\varphi^2}^{-1}\;\{\,Z_{\varphi^2}\,\}$:

$$\pm 1\left\{\frac{1}{4}\right\}\left[\frac{4(N+1)^2}{9}u_0^2+\frac{4(N+1)}{3}u_0v_0 +\frac{4(N+1)}{9}u_0z_0+v_0^2+\frac{2}{3}v_0z_0+\frac{1}{9}z_0^2\right],$$

где символ  обозначает дифференцирование линии (пропогатора) по m^2.

В заключении отметим, что вычисление констант ренормировок позволяет найти систему эволюционных уравнений на инвариантные заряды (β-функции), анализ устойчивости решений которой наряду с вычислением критических индексов, позволяет построить количественную теорию критического поведения исследуемых веществ. При этом чем выше порядок приближения (L-петлевое приближение), тем точнее будут предсказания теории.

Список литературы

[1] Zinn-Justin J. Quantum Field Theory and Critical Phenomena. Oxford: Clarendon. 2002.

[2] Васильев А.Н. Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. Санкт-Петербург: ПИЯФ. 1998.

[3] Варнашев К.Б. Метод ренормализационной группы в теории критического поведения. // Сборник статей 79-ой Всероссийской научно-технической конференции, посвященной Дню радио (22–26 апреля 2024 г.). Изд. СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2024. С. 324.

[4] Mukamel D., Krinsky S. Physical realizations of n ≥ 4-component vector models. II. ε-expansion analysis of the critical behavior. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 5078.

[5] Sokolov A.I., Varnashev K.B. Critical behavior of three-dimensional magnets with complicated ordering from three-loop renormalization-group expansions. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P.8363.

[6] Mudrov A.I., Varnashev K.B. Three-loop renormalization-group analysis of a complex model with stable fixed point: Critical exponents up to ε^3 and ε^4. // Phys. Rev. B. 1998. V. 57. P. 3562.

[7] Bak P., Mukamel D. Physical realizations of n ≥ 4-component vector models. III. Phase transitions in Cr, Eu, MnS_2, Ho, Dy, and Tb. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 5086.

[8] Antonenko S.A., Sokolov A.I. Phase transitions in anisotropic superconducting and magnetic systems with vector order parameters: Three-loop renormalization-group analysis. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 15901.

[9] Baker G.A. Jr., Nickel B.G., Meiron D.I. Critical indices from perturbation analysis of the Callan-Symanzik equation. // Phys. Rev. B. 1978. V. 17. P. 1365.

[10] Nickel B.G., Meiron D.I., Baker G.A. Jr. Compilation of 2-pt and 4-pt graphs for continuum spin models. University Guelph Report. 1977 (unpublished).