8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

VI. Seri Açılımlar

VI.A Düşük Sıcaklık Açılımı

Ağ modelleri, seri açılımlarla da incelenebilir. Bu tür açılımlar, tam olarak çözülebilen limitlerden başlayıp, tipik olarak, bu limitler etrafındaki tedirgemeleri ağ üzerinde diyagramlarla gösterirler. Yüksek sıcaklık açılımı bir sonraki kısımda anlatılmıştır. Burada, d boyutlu hiperkübik ağ üzerinde tanımlı, $-\beta\mathcal{H} = K\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j$ Hamiltoniyenine sahip, İsing modeli için *düşük sıcaklık* açılımını anlatacağız. $K = \beta J > 0$ ise temel durum ferromanyetiktir, yani bütün spinler için $\sigma_i = +1$. Bölüşüm fonksiyonu için seri açılım, bu durum etrafındaki düşük enerjili uyarımları dahil ederek elde edilir. En düşük enerjili uyarım, bir tek dönmüş spindir. Bu uyarım için, N konumdan herhangi biri seçilebilir, ki temel duruma göre enerji maliyeti $2K \times 2d$'dir. Bir sonraki en düşük enerjili uyarım, enerji maliyeti $4K \times (4d-2)$ ve çarpanı $N \times d$ (ikili için d farklı yönelim söz konusudur) olan bir negatif spin ikilisidir. Açılımdaki ilk birkaç terim:

$$Z = 2e^{NdK}\left[1 + Ne^{-4dK} + dNe^{-4(2d-1)K} + \frac{N(N-2d-1)}{2}e^{-8dK} + \cdots\right] \tag{VI.1}$$

olarak elde edilir. Dördüncü terim, ayrı iki spinin yönünü değiştirerek elde edilir. Sıfırıncı mertebedeki terim, yozluğu iki olan temel durumdan gelir. $N \to \infty$ limitinde, 2 genel çarpanı önemsizdir, ve

$$Z \simeq e^{NdK} \sum_{\ominus \text{ spin damlacıkları}} e^{-2K\times \text{ damlacığın sınırı}} \tag{VI.2}$$

Konum başına serbest enerji

$$\begin{aligned} -\beta f = \frac{\ln Z}{N} &= dK + \frac{1}{N}\ln\left[1 + Ne^{-4dK} + dNe^{-4(2d-1)K} + \frac{N(N-2d-1)}{2}e^{-8dK} + \cdots\right] \\ &= dK + e^{-4dK} + de^{-4(2d-1)K} - \frac{2d+1}{2}e^{-8dK} + \cdots \end{aligned} \tag{VI.3}$$

serisi ile verilir. Z'nin açılımında, N^2 ile orantılı terim açıkça sadeleşmiş olduğuna dikkat edin. Bu tarz N bağımlılığı, birbirinden bağımsız birkaç damlacığı olan *bağıntısız* diyagramlardan gelir. Serbest enerjinin yaygınlığı, bu terimlerin bağlı diyagramların çarpımı tarafından sadeleştirilmesini sağlar. O zaman, konum başına enerji

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\frac{\ln Z}{N}\right) = -J\frac{\partial}{\partial K}\left(\frac{\ln Z}{N}\right) \\ &= -J\left[d - 4de^{-4dK} - 4d(2d-1)e^{-4(2d-1)K} + 4d(2d+1)e^{-8dK} + \cdots\right] \end{aligned} \tag{VI.4}$$

olarak verilir ve ısı sığası

$$\begin{aligned}\frac{C}{Nk_B} &= \frac{1}{Nk_B}\frac{\partial E}{\partial T} = -\frac{K^2}{NJ}\frac{\partial E}{\partial K} \\ &= K^2\left[16d^2e^{-4dK} + 16d(2d-1)^2e^{-4(2d-1)K} - 32d^2(2d+1)e^{-8dK} + \cdots\right]\end{aligned} \tag{VI.5}$$

ile orantılıdır.

Bu tarz bir seri, K_c kritik çiftlenim sabitini, ve daha da önemlisi, düzensizleştiren geçişin tekilliklerini elde etmek için kullanılabilir mi? Varsayalım ki $C = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell u^\ell$ serisindeki bir kaç terimi belirledir. Isı sığasının, beklenen ıraksamasından,

$$C \simeq A\left(1 - \frac{u}{u_c}\right)^{-\alpha} = A\left[1 + \frac{\alpha}{u_c}u + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!u_c^2}u^2 + \cdots + \frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+\ell-1)}{l!u_c^\ell}u^\ell\cdots\right] \tag{VI.6}$$

şeklinde bir asimptotik açılım bekleriz. Yukarıdaki tekil şekil, üç parametre A, u_c ve α tarafından karakterize edilir. Bu parametreleri, serinin büyük ℓ değerleri için hesaplanan katsayılarına uymalarını bekleyerek elde etmeye çalışabiliriz, yani, arka arkaya gelen terimlerin oranını

$$\frac{a_\ell}{a_{\ell-1}} \simeq \left(\frac{\alpha+\ell-1}{\ell u_c}\right) = u_c^{-1}\left(1 + \frac{\alpha-1}{\ell}\right) \tag{VI.7}$$

ifadesine uydurarak. Bundan dolayı, $a_\ell/a_{\ell-1}$'in $1/\ell$'e göre grafiği, dikey ekseni u_c^{-1}'de kesen ve eğimi $u_c^{-1}(\alpha-1)$ olan bir doğru olması lazım. Ancak, sonlu bir $\sum_{\ell=0}^{\ell_m} d_\ell u^\ell$ toplamı eklemenin, tekillik şeklini değiştirmediğine, ama temel olarak ilk ℓ_m terimlerini α ve u_c^{-1}'i belirlemede faydasız kıldığına dikkat edin. Bundan dolayı, baştan, sonlu sayıda katsayı ile, bu tarz bir uydurma işleminin başarılı olacağının garantisi yoktur. Pratikte, bu işlem oldukça iyi çalışır, ve bu yolla, oldukça çok büyük sayıda terim dahil edilerek, $d = 3$'te kritik üstellerin (mesela $\alpha = 0.105 \pm 0.007$) çok iyi tahminleri elde edilmiştir.

Isi sığası için, denklem VI.5'de elde edilen üç terimin işaretleri, denklem VI.6'dan farklı olarak, farklıdır. Bu ,e^{-K}'da daha yüksek mertebeden terimlerde de devam ettiği için, yukarıdaki oran uydurma işlemi doğrudan uygulanamaz. İşaretlerin değişmesi, genelde, *karmaşık* $z = e^{-K}$ düzleminde, orijine, ilgilendiğimiz gerçek $z_c = e^{-K_c}$ tekil noktasına nazaran daha yakın bir tekilliğe işaret eder. Eğer, kompleks düzlemde bir $u(z)$ eşleştirmesi oluşturabilirsek, öyle ki, yalancı tekillikler, $u_c = u(z_c)$'den daha uzağa itilsin, o zaman, oran yöntemi kullanılabilir. Düşük sıcaklık serileri durumunda, $u = \tanh K$ amaca ulaşır. (Kısa bir süre sonra göstereceğimiz gibi, $\tanh K$' yüksek sıcaklık açılımında da doğal değişkendir.) Serilerin tekil davranışlarını incelemek için, *Padé yaklaştırmaları* gibi, oldukça gelişmiş metodlar geliştirilmiştir.

Düşük sıcaklık açılımları, Potts modeli gibi diğer *kesikli* spin sistemleri için de oluşturulabilir. *Sürekli* spinler için, düşük enerji uyarımları Goldstone modlarıdır, ve tedirgeme serisi, ağ grafikleri şeklinde gösterilemez. Bu durumda, düşük sıcaklık tasviri Goldstone modlarının Gaussiyan incelemesinden başlar. Serideki sonraki terimler, bu tarz modlar arasındaki etkileşimler içerir ve ilgili bir hesap, ileride yapılacaktır.

VI.B *Yüksek Sıcaklık Açılımı*

Yüksek sıcaklık açılımı kesikli ve sürekli sistemlerin ikisinde de oldukça iyi çalışır. Temel fikir, *bağımsız* spinlerden başlamak ve bölüşüm fonksiyonunu $\beta = (k_B T)^{-1}$'in kuvvetleri cinsinden açmaktır, yani

$$Z = \text{İz}\left(e^{-\beta\mathcal{H}}\right) = \text{İz}\left[1 - \beta\mathcal{H} + \frac{\beta^2\mathcal{H}^2}{2} - \cdots\right] \tag{VI.8}$$

ve

$$\frac{\ln Z}{N} = \frac{\ln Z_0}{N} - \beta\frac{\langle\mathcal{H}\rangle_0}{N} + \frac{\beta^2}{2}\frac{\langle\mathcal{H}^2\rangle_0 - \langle\mathcal{H}\rangle_0^2}{N} - \cdots \tag{VI.9}$$

$\langle\rangle_0$ ortalamaları, etkileşmeyen spinler üzerinden hesaplanmıştır. İsing modeli için, seriyi, aşağıda gösterildiği gibi, $\tanh K$'nın kuvvetleri üzerinden oluşturmak daha uygundur. $(\sigma_i\sigma_j)^2 = 1$ olduğu için, her bağ için Boltzman çarpanı

$$e^{K\sigma_i\sigma_j} = \frac{e^K + e^{-K}}{2} + \frac{e^K - e^{-K}}{2}\sigma_i\sigma_j = \cosh K(1 + t\sigma_i\sigma_j) \tag{VI.10}$$

şeklinde yazılabilir, burada $t \equiv \tanh K$, iyi bir yüksek sıcaklık açılım parametresidir. Bu dönüşümü ağdaki her bağa uygularsak

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j} = (\cosh K)^{\text{bağ sayısı}} \sum_{\{\sigma_i\}}\prod_{\langle i,j\rangle}(1 + t\sigma_i\sigma_j) \tag{VI.11}$$

elde edilir.

Ağdaki N_b bağ için, yukarıdaki çarpım 2^{N_b} tane terim yaratır, ki bunlar her $t\sigma_i\sigma_j$ çarpanı için, i ve j konumlarını birbirine bağlayan çizgiler çizerek diyagramatik olarak gösterilebilir. Her ağ bağı için, ya dolu, ya da boş olan, en fazla bir tane böyle bir bağ olabileceğine dikkat ediniz. Bu K yerine t'yi açılım parametresi kullanarak elde edilen büyük bir sadeleştirmedir. Şimdi, her konum, bir tane $\sigma_i^{p_i}$ çarpanı elde eder, burada p_i, i'den çıkan dolu bağ sayısıdır. $\sigma_i = \pm 1$ iki olası değeri üzerinden toplamak, p_i çift ise iki çarpanı, p_i tek ise 0 verir. Dolayısıyla, toplamdan geriye kalan diyagramlar, her konumdan çift sayıda bağ geçen diyagramlardır. Elde edilen diyagramlar, ağ üzerinde kapalı çizgiler toplamıdır, ve

$$Z = 2^N \times (\cosh K)^{N_b} \sum_{\text{Bütün kapalı grafikler}} t^{\text{grafikteki bağ sayısı}} \tag{VI.12}$$

d-boyutlu hiperkübik bir ağ için, en küçük kapalı grafık 4 bağdan oluşan bir karedir, ki $d(d-1)/2$ farklı olası yönelimi vardır. Bir sonraki grafiğin 6 bağı olduğundan

$$Z = 2^N \times (\cosh K)^{N_b}\left[1 + \frac{d(d-1)N}{2}t^4 + d(d-1)(2d-3)t^6 + \cdots\right] \tag{VI.13}$$

ve

$$\frac{\ln Z}{N} = \ln 2 + d \ln \cosh K + \frac{d(d-1)}{2} t^4 + \cdots \tag{VI.14}$$

Takip eden kısımlarda, yüksek sıcaklık metodunu sayısal bir alet olarak değil, ancak şunları göstermek için kullanacağız: (a) $d = 1$'de İsing modelinin tam çözümü. (b) Düşük ve yüksek sıcaklıklardaki modelleri ilişkilendiren eşleklikler. (c) Gaussiyan modelinin yüksek sıcaklarda geçerliliği. (d) $d = 2$'de İsing modelinin kesin çözümü.

VI.C Tek Boyutlu İsing Modelinin Tam Çözümü

Grafik yöntem, $d = 1$'de sıfır alandaki İsing modelinin hızlı bir çözüm yolunun verir. Açık ve kapalı (tekrarlanan) sınır koşulları olan zincirlerdeki çözümleri kıyaslayıp karşılaştırabiliriz.

1. N konumlu bir *açık zincir*in $N_b = N - 1$ bağı vardır. Böyle bir ağda herhangi bir kapalı grafik çizmek imkansızdır, dolayısıyla

$$Z = 2^N \cosh K^{N-1}, \quad \Longrightarrow \quad \frac{\ln Z}{N} = \ln\left[2\; coshK\right] - \frac{\ln\left[\cosh K\right]}{N} \tag{VI.15}$$

Aynı yöntem, $\langle \sigma_n \sigma_n \rangle$ bağdaşıklık fonksiyonunu hesplamak için de kullanılabilir, çünkü

$$\langle \sigma_m \sigma_n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K \sum_{\langle i,j \rangle}} \sigma_m \sigma_n = \frac{2^N (\cosh K)^{N-1}}{Z} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_m \sigma_n \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + t \sigma_i \sigma_j) \tag{VI.16}$$

Paydaki terimler, fazladan $\sigma_m \sigma_n$ çarpanı içerirler. $\sigma_m = \pm 1$ ve $\sigma_n = \pm 1$ değerleri üzerinden toplayınca sonlu bir sayı elde etmek için, bu *dış* konumlardan tek sayıda bağ çıkan grafiklere bakmamız lazım. Açık bir zincir için, böyle tek grafik, iki konumu doğrudan birbirine bağlayan grafiktir, ve sonuç

$$\langle \sigma_m \sigma_n \rangle = t^{|m-n|} = e^{-|m-n|/\xi}, \;\; \xi = -\frac{1}{\ln \tanh K} \text{ olmak üzere} \tag{VI.17}$$

Bu sonuçlar, bölüm V.B'deki RG sonuçları ile uyum içindedir; bağdaşıklık uzunluğu, $K \to \infty$ iken e^{2K} olarak ıraksar, ve bağdaşıklıkların üstel azalmalarını değiştiren bir kuvvet yasası yoktur.

2. *Kapalı bir zincirin* konum sayısı ve bağ sayısı aynıdır, N. Artık, bütün zinciri dolanan bir tane kapalı eğri çizmek mümkündür, ve

$$\begin{aligned} Z = (2\cosh K)^N \left[1 + t^N\right] &= 2^N \left(\cosh K^N + \sinh K^N\right) \\ \Longrightarrow \quad \frac{\ln Z}{N} &= \ln(2\cosh K) + \frac{\ln\left[1 + t^N\right]}{N} \end{aligned} \tag{VI.18}$$

Kapalı ve açık zincirlerin serbest enerjileri arasındaki fark, termodinamik limitte yok olur. Yaygın serbest enerjiye gelen düzeltme, $N \ln(2 + \cosh K)$, açık zincir için $1/N$ mertebesindedir, ve yüzey serbest enerjisi olarak düşünülünebilir. Sınırı olmayan kapalı zincir için böyle bir düzeltme yoktur; onun yerine t^N üstel terimi vardır. Bağdaşıklık fonksiyonu yine denklem VI.16'dan elde edilebilir. m ve n'yi birbirine bağlayan iki yol vardır, ve

$$\langle \sigma_m \sigma_n \rangle = \frac{t^{|m-n|} + t^{N-|m-n|}}{1 + t^N} \tag{VI.19}$$

Son cevabın, m ve n konumları arasındaki uzaklığı ölçmek için kullanılan iki yola göre simetrik olduğuna dikkat edin.