8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

VI.F Hayalet İlmekleri Üzerinden Toplam

Yüksek sıcaklık serisi *yaklaşık olarak*, Gaussiyan modeli yeniden üretecek şekilde toplanabilir. Bu ilişki, Gaussiyan davranışın niye yüksek boyutlarda uygunalabilirliğini daha iyi anlamamızı sağlarken, bir sonraki kısımda, iki boyutta seriyi tam olarak toplamamızın yolunu da hazırlar. d-boyutlu hiperkubik ağdaki İsing modelinin bölüşüm fonksiyonunun yüksek sıcaklıklardaki serisi

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j} = 2^N \cosh^{dN} K \times S \qquad \text{(VI.35)}$$

ifadesinden elde edilebilir, burada S ağ üzerindeki, ağırlıkları $t \equiv \tanh K$'nın grafikteki bağların sayısı kuvveti olan, bütün izin verilen grafikler üzerinden toplamdır. İzin verilen grafiklerin konum başına çift sayıda bağı vardır. En basit grafiklerin, tek kapalı ilmek topolojisi vardır. *Bağlantılı olmayan* kapalı ilmeklerden oluşan grafikler de vardır. Kümülant açılımını hatırlayarak,

$$\Xi = \text{ tek ilmek içeren grafiklerin katkılarının toplamı} \qquad \text{(VI.36)}$$

olarak eşitleyip,

$$\begin{aligned} S' = \exp(\Xi) &= 1 + \Xi + \frac{1}{2}(\Xi)^2 + \frac{1}{6}(\Xi)^3 + \cdots \\ &= 1 + (\text{1 ilmek grafikleri}) + (\text{2 ilmek grafikleri}) + (\text{3 ilmek grafikleri}) + \cdots \end{aligned} \qquad \text{(VI.37)}$$

toplamını tanımlayalım.

Benzerliklerine rağmen, S ve S' toplamları özdeş değildir: Bir sonraki kisimda daha detaylı tartışılacak olan, tek bir konumda kesişen ilmeklerle ilgili belirsizlikler vardır. Daha da önemlisi, S', belirli bir bağın birden fazla katkı verdiği fazladan grafikleri içerirken, orijinal S toplamında, her ağ bağı, ya 1 ya da t çarpanı ile katkı verir. Bunun ortaya çıkma sebebi, Ξ'yi ℓ'inci kuvvetine yükselttiğimizde, belirli bir bağ ℓ defa katkı vererek t^ℓ katkısını verebilir. Bir bağından birden fazla olması yaklaşıklığı ruhunda, Ξ'da fazladan kapalı yollara izin vereceğiz, ki bunlar ilmeği kapatırken, belirli bir bağın üzerinden birden çok geçildiği grafiklerdir. Nitel olarak, S, monomer kaçarlığı t olan, *kendinden kaçınan* polimer ilmeklerinden oluşan bir gazın bölüşüm fonksiyonudur. Kendinden kaçma koşulu, S''da ihmal edilmiştir, ki bu yüzden, hiç bir sorun olmadan birbirleri içinden geçebilen, *hayalet* polimer ilmeklerden oluşan gaza karşılık gelir. Ağ üzerinde, kapalı rastgele yürüme ile, çeşitli şekillerdeki ilmekler oluşturulabilir, ve hayalet ilmeklerin karşılık gelen serbest enerjisi

$$\begin{aligned} \ln S' &= \sum \text{ağ üzerindeki bütün kapalı rastgele yürümeler } \times t^{\text{yürüyüşün uzunluğu}} \\ &= \sum_\ell \frac{t^\ell}{\ell}(\ell \text{ adımlı ve } \mathbf{0} \text{ da başlayıp biten kapalı yürümelerin sayısı}) \end{aligned} \qquad \text{(VI.38)}$$

Yaygınlığın garanti olduğuna dikkat edin, çünkü (sınır etkilerine kadar) aynı ilmek, ağ üzerindeki herhangi bir noktadan başlayabilir. Genel $1/\ell$ çarpanı, ℓ uzunluğundaki bir ilmeğin ℓ farklı noktadan başlayabileceğini gözönüne alır.

Ağ üzerindeki bütün olası (hayalet) rastgele yürüyüşleri saymak için bir *aktarma matrisi* yöntemi kullanılabilir. Bir küme $N \times N$ matrisi tanımlayalım

$$\langle \mathbf{i} \mid W(\ell) \mid \mathbf{j} \rangle \equiv \mathbf{j}\text{'den } \mathbf{i}\text{'ye } \ell \text{ adımdaki yürüyüşlerin sayısı} \tag{VI.39}$$

ki bunlar cinsinden, denklem VI.38

$$\frac{\ln S'}{N} = \frac{1}{2} \sum_{\ell} \frac{t^{\ell}}{\ell} \langle \mathbf{0} \mid W(\ell) \mid \mathbf{0} \rangle \tag{VI.40}$$

halini alır. Fazladan 2 çarpanı, aynı ilmeğin, iki zıt yönlerdeki iki rastgele yürüyüşle geçilebileceğinden dolayı eklenmiştir. Benzer şekilde, spin-spin bağdaşıklık fonksiyonu

$$\langle \sigma(\mathbf{0}) \sigma(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma(\mathbf{0}) \sigma(\mathbf{r}) \prod_{\langle ij \rangle} (1 + t\sigma_i \sigma_j) \tag{VI.41}$$

ağ üzerindeki $\mathbf{0}$ ile $\mathbf{r}$ noktalarını birbirine bağlayan yollar üzerinden bir toplamla ilişkilidir. İki noktayı direkt olarak birbirine bağlayan basit yollara ek olarak, fazladan kapalı ilmekler içeren *bağlantısız* grafikler de vardır. Aynı, yollar arasındaki her türlü kesişmeye izin veren yaklaştırmada, S' bölüşüm fonksiyonu, denklem VI.41'in pay ve paydasından çarpanlarına ayrılabilir, ve

$$\langle \sigma(\mathbf{0}) \sigma(\mathbf{r}) \rangle \approx \sum_{\ell} t^{\ell} \langle \mathbf{r} \mid W(\ell) \mid \mathbf{0} \rangle \tag{VI.42}$$

Hayalet yollarının ağ üzerinde sayımı, *Markov* özelliklerini kullanarak kolayca yapılır. Bu özellik, rastgele yürüyüşün her adımının, son konumundan yapılması ve önceki adımlardan bağımsız olmasıdır. Dolayısıyla, yürüyüşlerin sayısı *yinelemeli* olarak sayılabilir. İlk önce, $\mathbf{0}$'dan $\mathbf{r}$ ye, ℓ adımda herhangi bir yürüyüş, $\mathbf{0}$'dan $\mathbf{r}'$'ne $\ell-1$ adımlık bir yürüyüş ve ardından $\mathbf{r}'$'den $\mathbf{r}$'ye tek adımlık bir yürüyüş olarak elde edilebilir. Aradaki noktanın bütün olası konumları üzerinden toplayarak

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \mid W(\ell) \mid \mathbf{0} \rangle &= \sum_{\mathbf{r}'} \langle \mathbf{r} \mid W(1) \mid \mathbf{r}' \rangle \times \langle \mathbf{r}' \mid W(\ell-1) \mid \mathbf{0} \rangle \\ &= \langle \mathbf{r} \mid TW(\ell-1) \mid \mathbf{0} \rangle \end{aligned} \tag{VI.43}$$

elde ederiz, buradaki toplam iki matrisin çarpımına karşılık gelir, ve $T \equiv W(1)$ olarak tanımladık. Yinemele işlemi sürdürülebilir ve

$$W(\ell) = TW(\ell-1) = T^2 W(\ell-2)^2 = \cdots = T^{\ell} \tag{VI.44}$$

elde ederiz. Bundan dolayı, bütün rastgele yürüyüşler T *aktarma matrisi* ile yaratılırlar, ki elemanları

$$\langle \mathbf{r} \mid T \mid \mathbf{r}' \rangle = \begin{cases} 1 & \mathbf{r} \text{ ve } \mathbf{r}' \text{ en yakın komşular ise} \\ 0 & \text{diğer durumlarda} \end{cases} \tag{VI.45}$$

(Ayrıca *yakınlık*, veya *bağlanırlık* matrisi olarak da bilinir.) Örnek olarak, $d = 2$'de

$$\langle x, y \mid T \mid x', y' \rangle = \delta_{y,y'}(\delta_{x,x'+1} + \delta_{x,x'-1}) + \delta_{x,x'}(\delta_{y,y'+1} + \delta_{y,y'-1}) \tag{VI.46}$$

ve T, $\mid x, y\rangle = \delta_{x,0}\delta_{y,0}$'dan başlayan bir yürüyücüye arka arkaya uygulanınca,

$$\begin{matrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \xrightarrow{T} \begin{matrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{matrix} \xrightarrow{T} \begin{matrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 4 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{matrix} \xrightarrow{T} \cdots$$

şeklini türetir. Her konumdaki değer, ℓ adımdan sonra o noktada biten yürüyüşlerin sayısıdır.

Rastgele yürümelerin, çeşitli özellikleri, T matrisini köşegenleştirerek elde edilebilir. Ağın ötemele simetrisinden dolayı, bu, $\langle \mathbf{r} \mid \mathbf{q}\rangle = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}/\sqrt{N}$ Fourier bazında elde edilir. Örnek olarak $d = 2$'de denklem VI.46'dan başlarsak,

$$\begin{aligned} \langle x, y \mid T \mid q_x, q_y\rangle &= \sum_{x',y'} \langle x, y \mid T \mid x', y'\rangle\langle x', y' \mid q_x, q_y\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}}\left[e^{iq_y y}\left(e^{iq_x(x+1)} + e^{iq_x(x-1)}\right) + e^{iq_x x}\left(e^{iq_y(y+1)} + e^{iq_y(y-1)}\right)\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(q_x x + q_y y)}\left[2\cos q_x + 2\cos q_y\right] = T(q_x, q_y)\langle x, y \mid q_x, q_y\rangle \end{aligned} \tag{VI.47}$$

olduğu gösterilebilir. d boyutlu hiperkübik ağ için genelleştirilmiş öz değeri

$$T(\mathbf{q}) = 2\sum_{\alpha=1}^{d} \cos q_\alpha \tag{VI.48}$$

olur.

Denklem VI.42'deki bağdaşıklık fonksiyonu, şimdi

$$\begin{aligned} \langle\sigma(\mathbf{r})\sigma(\mathbf{0})\rangle &\approx \sum_{\ell}^{\infty} t^\ell \langle \mathbf{r} \mid W(\ell) \mid \mathbf{0}\rangle = \sum_{\ell}^{\infty}\langle \mathbf{r} \mid (tT)^\ell \mid \mathbf{0}\rangle \\ &= \left\langle \mathbf{r} \left| \frac{1}{1-tT} \right| \mathbf{0}\right\rangle = \sum_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{r} \mid \mathbf{q}\rangle \frac{1}{1 - tT(\mathbf{q})}\langle \mathbf{q} \mid \mathbf{0}\rangle \\ &= N\int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}\frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{N}\frac{1}{1 - 2t\sum_{\alpha=1}^{d}\cos q_\alpha} = \int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}\frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{1 - 2t\sum_\alpha \cos q_\alpha} \end{aligned} \tag{VI.49}$$

olarak hesaplanır. $t \to 0$ iken, en kısa yollar en az enerjiye malolur ve $\langle\sigma(\mathbf{0})\sigma(\mathbf{r})\rangle \sim t^{|\mathbf{r}|}$. t artarken, daha uzun yollar toplama asıl katkıyı vermeye başlar, çünkü daha fazladırlar (yani, entropik olarak daha avantajlıdırlar). Sonunda, $1 - tT(\mathbf{0}) = 0$ için, yani $2d \times t_c = 1$, bir tekillik vardır, ki bu zaman uzun yollar önemli olur. $t < t_c$ için bölüşüm fonksiyonu küçük ilmekler tarafından tayin edilir, ve iki uzak noktayı birbirine bağlayan polimer, gerginliği yüzünden gerilir. Kaçarlık t_c'yi geçtiği zaman, gerilim yok olur ve rastgele uzunluktaki ilmekler yaratılır. Açıkça, kesişimlerin ihmal edilmesi (ki bunlar sonlu yoğunlukta sistemi kararlılaştırırlar) artık bu limitte geçerli değildir. Bu geçiş, yüksek sıcaklık serisini gösteren yollar dilinde, İsing düzenlenmesinin kendini göstermesidir. Yüksek sıcaklık tarafından geçişe yaklaşınca, toplamlar, çok uzun yollar tarafından belirlenirler. Bu nedenle, denklem VI.49'daki payda, küçük $\mathbf{q}$ için

$$1 - tT(\mathbf{q}) = 1 - 2t\sum_{\alpha=1}^{d}\cos q_\alpha \simeq (1-2dt) + tq^2 + \mathcal{O}(q^4) \approx t_c(\xi^{-2} + q^2 + \mathcal{O}(q^4)) \tag{VI.50}$$

şeklinde açılabilir, burada

$$\xi \equiv \left(\frac{1-2dt}{t_c}\right)^{-1/2} \tag{VI.51}$$

Elde edilen bağdaşıklık fonksiyonları, $\langle\sigma(\mathbf{0})\sigma(\mathbf{r})\rangle \propto \int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}/(q^2+\xi^{-2})$, Gaussiyan modelde elde edilenlerle aynıdır, ve

$$\langle\sigma(\mathbf{0})\sigma(\mathbf{r})\rangle \propto \begin{cases} \frac{1}{r^{d-2}} & r < \xi \text{ için} \quad (\eta = 0) \\ \frac{e^{-r/\xi}}{r^{(d-1)/2}} & r > \xi \text{ için} \end{cases} \tag{VI.52}$$

Denklem VI.51'deki bağdaşıklık uzunluğu $\xi \sim (t_c - t)^{-1/2}$ olarak ıraksar, yani Gaussiyan üsteli $\nu = 1/2$ ile.

Denklem VI.40'taki serbest enerjiyi de

$$\begin{aligned} \frac{\ln S'}{N} &= \frac{1}{2}\sum_{\ell}^{\infty}\frac{t^\ell}{\ell}\langle\mathbf{0} \mid W(\ell) \mid \mathbf{0}\rangle = \frac{1}{2}\left\langle\mathbf{0}\left|\frac{t^\ell T^\ell}{\ell}\right|\mathbf{0}\right\rangle \\ &= -\frac{1}{2}\langle\mathbf{0} \mid \ln(1-tT) \mid \mathbf{0}\rangle = -\frac{N}{2}\int\frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}\langle\mathbf{0} \mid \mathbf{q}\rangle \ln(1-tT(\mathbf{q}))\langle\mathbf{q} \mid \mathbf{0}\rangle \\ &= -\frac{1}{2}\int\frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}\ln\left(1-2t\sum_{\alpha=1}^{d}\cos q_\alpha\right) \end{aligned} \tag{VI.53}$$

olarak hesaplayabiliriz. $t_c = 1/(2d)$'deki kritik noktanın yakınlarında, logaritmanın argümanı, denklem VI.50'den, $(q^2 + \xi^{-2})$ ile orantılıdır. Bu tıpkı Gaussiyan modelde olduğu gibidir, ve daha önce de tartışıldığı gibi, serbest enerjinin tekil tarafı

$$f_{\text{tekil}} \propto \xi^{-d} \propto (t_c - t)^{d/2} \tag{VI.54}$$

olarak ölçeklenir. Isı sığasının tekil kısmı, iki defa türev aldıktan sonra elde edilen, $\alpha = 2 - d/2$ üsteli tarafından kontrol edilir. Denklemler VI.49 ve VI.53'deki toplamları hesaplarken, ℓ için alt sınır dikkatli hesaplanmamıştır. Denklem VI.49'daki serinin $\ell = 0$'dan, ve denklem VI.53'dekinin de $\ell = 1$'den başladığı varsayılmıştır. Gerçekte, iki serinin de ilk birkaç terimi sıfır olabilir, çünkü adım sayısı $\mathbf{r}$'den $\mathbf{0}$'a yetişecek kadar, veya kapalı bir ilmek oluşturacak kadar fazla değildir. İlk birkaç terim, serinin *tekil* davranışını etkilemeyeceği için, bu önemli bir ihmal değildir. İlk birkaç terimi düzgün olarak hesaplamak sadece denklemler VI.49 ve VI.53'te hesaplanan tekil yapıya analitik düzeltmeler ekler.

Bu sonuçların, Gaussiyan modele eşitliği, alan-parçacık eşlekliğinin bir görünümüdür. Alan teorik tasvirde, (sanal) zaman, ek bir boyut olarak ortaya çıkar, ve iki nokta bağdaşıklıkları, bir parçacığın, bir uzay-zaman noktasından bir başkasına ilerleme olasılığını tasvir eder. Dalga tanımında, bu olasılık, Schrödinger denklemi kullanılarak dalga fonksiyonunun evrimi sağlanarak hesaplanır. Alternatif olarak, bu olasılık, iki noktayı birbirine bağlayan bütün (Feynman) yolların, her biri doğru eylemle ağırıklandırılarak, toplamı olarak hesaplanabilir. İkinci toplam, yukarıdaki $\langle\sigma(\mathbf{r})\sigma(\mathbf{0})\rangle$ hesabına benzer.

Bu yaklaşım, faz geçişinin ilginç bir geometrik yorumunu verir. Uzun erimli düzenin oluşması, sistemin bütün kısımlarının aynı durumu seçtiği anlamına gelir. Bu bilgi, en yakın komşuları birbirine bağlayan bağlarla taşınır, ve orijinden $\mathbf{r}$ noktasına, bu iki noktayı birbirine bağlayan bütün yollarla taşınabilir. t kaçarlığı, komşu konumlar arasında bilgi taşınımının güvenilirliğinin bir ölçüsüdür. Tek boyutlu bir zincir boyunca, $t = 1$ değilse, taşınan bilgi büyük mesafelerde azalır, ve uzun mesafeli düzen oluşturmak imkansızdır. Daha yüksek boyutlarda, çok daha fazla yol vardır, ve bütün yollardan gelen bilgileri toplayarak, $t < 1$'de düzen oluşturmak mümkündür. ℓ uzunluğundaki yolların sayısı $(2d)^\ell$ olarak büyürken, bilgi içerikleri t^ℓ olarak azaldığı için, geçiş $t_c = 1/(2d)$'de olur. (Daha iyi bir yakınlaştırma, rastgele bir yürüyüşün geriye dönüş yapamayacağı koşulunu kullanarak elde edilebilir. Bu durumda, yürüyüşlerin sayısı $(2d-1)^\ell$ şeklinde büyür.) ℓ uzunluğundaki yollardan gelen bilgiler $(2dt)^\ell$ ile ağırlıklandırılırlar, ve $t < t_c$ için üstel olarak azalırlar. Karakteristik yol uzunluğu $\bar{\ell} = -1/\ln(2dt)$, geçişe yaklaştıkça, $(t_c - t)^{-1}$ ile ıraksar. $\ell \ll \bar{\ell}$ olan yollar için, oldukça iyi bilgi geçişi vardır. Bu tür yollar, ağ üzerinde rastgele yürüyüş yaparlar ve $\xi \approx \bar{\ell}^{1/2}$ mesafesini alırlar. ν'nun $1/2$ üsteli ile ıraksaması, yolların rastgele yürüme doğasının bir sonucudur.

Klasik resim, $d \leq 4$'te niye başarısız olur? Faz geçişi yakınında belirleyici olan yollara odaklanalım. Bu tarz yolların kesişmelerini ihmal etmek geçerli midir? Rastgele yürümeler fraktal (Hausdorf) boyutu $d_f = 2$ olan nesneler olarak düşünülebilir. Bu, bir nesnenin kütle ve boyutu arasındaki ilişkiyi veren $M \propto R^{d_f}$ genel tanımından, ve rastgele yürüyüşün boyutunun ($R \propto \xi$), uzunluğunun ($M \propto \ell$) karekökü olduğu gözleminde elde edilir. Boyutları d_1 ve d_2 olan iki nicelik, d boyutlu uzayda, $d_1 + d_2 \geq d$ ise genel olarak kesişirler. Dolayısıyle, rastgele yürüyücülerimiz $d \geq d_u = 2 + 2 = 4$'de keşişmeleri ihtimali zayıftır, ve yukarıdaki, kesişmeleri ihmal ederek elde edilen (Gaussiyan) sonuçlar asimptotik olarak doğrudur. Üst kritik boyut 4'ün altında, rastgele yürüyücüler, sık karşılaşırlar, ve kesişmeleri doğru olarak incelenmelidir. İlerleticinin um^4 ile tedirgemeli hesabında elde dilen diyagramlar, tam olarak yolların kesişmelerini hesaba katmaya karşılık gelir. (Her u çarpanı, bir kesişmeye karşılık gelir.) Şimdi açıktır ki, kendinden kaçınma koşulu, yolları rastgele yürüme boyutundan şişirerek ν üstelinin artmasına yol açacaktır. Geçişin altında, yolların uzunluğu, sınırsız olarak büyür ve kendinden kaçınma koşulu, sistemin kararlılığını sağlamak için gereklidir.

İlmek açılımı n-bileşenli spinler için kolaylıkla genelleştirilebilir. Tek fark, her kapalı ilmeğin n çarpanı getirmesidir. Kesişmelerin ihmal edildiği hayalet limitinde, serbest enerji (denklem VI.53) sadece n ile çarpılırken, bağdaşıklık uzunluğu değişmez (tıpkı Gaussiyan modelde olduğu gibi). Kesişmelerden kaynaklı düzeltmeler, ki $d < 4$'de kritik davranışı değiştiriler, artık n'ye bağlıdır. Mesela, iki nokta bağdaşıklık fonksiyonunu düzeltirken, rastgele yürüyüşlerin, ilmeklerle olan kesişmeleriyle beraber (kaçarlığı n olan), kendileriyle kesişmelerini çıkarmamız gerekir. İlerleticinin, $u(\vec{m} \cdot \vec{m})^2$ terimi için, tedirgeme serisiyle olan benzerliği, yine, açıktır.