8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

VI.G Kare Ağ İsing Modelinin Tam Serbest Enerjisi

Denklem VI.35'te belirtildiği gibi, İsing modeli, ağ üzerindeki yollar bütünü üzerinden bir S toplamı ile ilgilidir. Kare bir ağ için izin verilen grafiklerin konum başına 2 veya 4 bağı vardır. Her bağ, grafikte sadece bir kere olabilir, ve $t \equiv \tanh K$ çarpanı getirir. S'yi, tam olarak hesaplanabilen, ağ üzerindeki bütün olası hayalet rastgele yürüyüşleri üzerinden bir toplam olan S' ile değiştirmek cazip gelse de, bu, S'yi olduğundan fazla tahmin etmeye yol açar. İki toplam arasındaki fark, rastgele yürüyüşlerin kesişmelerinden kaynaklanır, ve iki sınıfa ayrılabilir:

(a) Bir *konumda* kesişen, yani bir noktada 4 bağ olan, grafikler üzerinden tekrar sayım vardır. Bir konumda karşılaşan iki ilmekten oluşan grafiği düşünün. Bir yürüyücü, kesişim noktasına geldiğinde üç seçeneği olduğundan, bu grafik, *üç ayrı rastgele yürüyüş* ile gösterilebilir. Bir seçenek, iki bağlı olmayan ilmeğe yol açar, diğer ikisi, kendini kesen veya kesmeyen tek ilmeklerdir.

(b) S''daki bağımsız rastgele yürüyücüler, belli bir ağ *bağından* birden fazla geçebilirler.

Bu koşulları dahil etmek, yollar üzerinde etkileşimleri göz önüne almaya karşılık gelir. Elde edilen etkileşen rastgele yürüyücüler, her adım, bir önceki adımdan ve diğer yürüyücülerden bağımsız olmadığı için, Markoviyen değillerdir. Bu tarz etkileşen yürüyüşler, genelde, kesin hesaplamaya uygun değillerse de, iki boyutta, ilginç bir topolojik özellik, aşağıdaki ifadeyi kullanmamıza imkan tanır:

$$S = \sum \textit{Hiç U dönüşü olmayan} \text{ bütün rasgele yürüyüşler topluluğu} \times t^{\text{bağların sayısı}} \times (-1)^{\text{kesişmelerin sayısı}} \tag{VI.55}$$

Negatif işaretler, yüksek tahmini azaltıp, kesin toplamı mümkün kılarlar.
İspat: Yukarıda bahsettiğimiz iki problemle sırasıyla ilgileneceğiz
(a) Çok kesişmeli bir grafiğe bakalım, ve belirli bir tanesine odaklanalım. Bir yürüyücü, böyle bir kesişime iki kere girip çıkmalıdır. Bu, üç farklı şekilde yapılabilir ve sadece bir tanesi, yürüyücünün kendi yolunu kesmesine karşılık gelir (yürüyücü kesişimden doğrudan karşıya giderse). Bu dizilim denklem VI.55'e göre fazladan bir (-1) çarpanı içerir. Dolayısıyla, diğer kesmelerden bağımsız olarak, bu üç dizilim, toplandığında 1 çarpanı ile gelir. Her kesişme noktasında aynı mantıkla yaklaşırsak, fazladan sayma promlemi çözülmüş olur, ve grafiği bütün olası şekillerde takip edişler üzerinden toplam, doğru bir çarpanını verir.
(b) İki yürüyücü tarafından geçilen (ya da aynı yürüyücü tarafından iki kere geçilen) bir bağ düşünelim. Bağı, iki tarafı olan bir yol olarak hayal edebiliriz. İki yolun, yola aynı taraftan girip çıktığı her dizilim için, yolların zıt taraflarından girip çıktığı bir başkası vardır. Sonraki, yolların kesişimini içerir, ve dolayısıyla, bir öncekine kıyasla bir eksi işareti taşır. İki olasılık birbirini sadeleştirir! Bu düşünme şekli, herhangi bir bağdan çoklu geçişler için genelleştirilebilir. Tek istisnası, bu ikili bağın bir U dönüşü sonucu oluştuğu durumdadır. Denklem VI.55'de böyle geri adımların açıkça dışlanmasının nedeni budur.

U-dönüşü yapmayan, ve ağırlığı $(-1)^{\text{kesişimlerin sayısı}}$ olan, rastgele yürüyücüleri RW* olarak gösterelim. O zaman, denklem VI.37'deki gibi S'deki terimler

$$\begin{aligned} S &= \sum(\text{tek ilmekli RW}^*\text{lar}) + \sum(\text{iki ilmekli RW}^*\text{lar}) + \sum(\text{3 ilmekli RW}^*\text{lar}) + \cdots \\ &= \exp\left[\sum(\text{tek ilmekli RW}^*\text{lar})\right] \end{aligned} \quad \text{(VI.56)}$$

şeklinde düzenlenebilir. RW*lar arasındaki tek etkileşim, kesişimlerle ilgili işaret olduğu için, üstelleştirme doğrudur. İki RW* ilmeği, çift sayıda kesiştiği için, bu hiç etkileşmemekle denktir. Denklem VI.35'i kullanarak, tüm İsing serbest enerjisi

$$\ln Z = N\ln 2 + 2N\ln\cosh K + \sum(\text{ tek ilmekli RW}^*\text{lar} \times t^{\text{bağların \#}}) \quad \text{(VI.57)}$$

olarak hesaplanabilir. Toplamı, bağların sayısı cinsinden organize edersek, ve ağ üzerindeki öteleme simetrisini (sınırlardan dolayı düzeltmelere kadar) kullanırsak,

$$\frac{\ln Z}{N} = \ln\left(2\cosh^2 K\right) + \sum_{\ell}^{\infty}\frac{t^\ell}{\ell}\langle \mathbf{0} \mid W^*(\ell) \mid \mathbf{0}\rangle \quad \text{(VI.58)}$$

burada

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{0} \mid W^*(\ell) \mid \mathbf{0}\rangle &= \mathbf{0}\text{'dan } \mathbf{0}\text{'a } U \text{ dönüşü yapmayan, } \ell \text{ adımlı kapalı ilmeklerin sayısı} \\ &\quad \times(-1)^{\text{kesişmelerin \#}} \end{aligned} \quad \text{(VI.59)}$$

U dönüşümlerinin olmaması, yerel bir koşul, ilmekleri saymayı daha da karmaşıklaştırmaz. Diğer yandan, kesişmelerin sayısı, ilmeğin tamamının diziliminin bir fonksiyonudur ve Markoviyan olmayan bir özelliktir. Neyseki, iki boyutta, kesişmelerin sayısının paritesi, *yerel* incelemelerle elde edilebilir. İlk adım, ilmekleri, *yönlendirilmiş* rastgele yürüyüşlerden, yolun yüründüğü doğrultu yönünda bir ok koyarak belirtilmiş, oluşturmaktır. Her ilmek, iki yönde yürünebileceği için,

$$\langle \mathbf{0} \mid W^*(\ell) \mid \mathbf{0}\rangle = \frac{1}{2}\sum \mathbf{0}\text{'dan } \mathbf{0}\text{'a, } U \text{ dönüşü olmayan, } \ell \text{ adımlı, } \textit{yönlendirilmiş} \text{ RW}^* \text{ ilmekleri} \times (-1)^{n_c} \quad \text{(VI.60)}$$

burada n_c, ilmeğin kendini kesme sayısıdır. Şimdi, aşağıdaki topolojik sonuçtan faydalanabiliriz: *Whitney'in Teoremi:* Düzlemsel bir halkanın, kendini kesme sayısı, teğet vektörünün ilmiğin etrafında dönmesi sırasında döndüğü toplam Θ açısıyla

$$(n_c)_{\text{mod } 2} = \left(1 + \frac{\Theta}{2\pi}\right)_{\text{mod } 2} \quad \text{(VI.61)}$$

şeklinde ilişkilidir. Bu teorem, birkaç örnekle kontrol edilebilir. Tek bir ilmek $\Theta = \pm 2\pi$'ye karşılık gelirken, tek kesme, $\Theta = 0$ verir.

Toplam Θ açısı, yürüyücünün her adımdaki dönmelerinin toplamına eşit olduğundan, kesişmelerin paritesi, sadece *yerel* bilgiyi kullanarak,

$$(-1)^{n_c} = e^{i\pi n_c} = \exp\left[i\pi\left(1+\frac{\Theta}{2\pi}\right)\right] = -e^{\frac{i}{2}\sum_{j=1}^{\ell}\theta_j} \qquad \text{(VI.62)}$$

şeklinde hesaplanabilir, burada θ_j, yürüyücünün $j$inci adımda döndüğü açıdır, ki buradan

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{0} \mid W^*(\ell) \mid \mathbf{0}\rangle &= -\frac{1}{2}\sum \mathbf{0}\text{'dan } \mathbf{0}\text{'a, } U \text{ dönüşsüz, } \ell \text{ adımlı, yönlendirilmiş RW}^* \text{ ilmekleri}\\ &\times \exp\left(\frac{1}{2}\sum \text{teğet vektörün açısındaki yerel değişim}\right) \qquad \text{(VI.63)}\end{aligned}$$

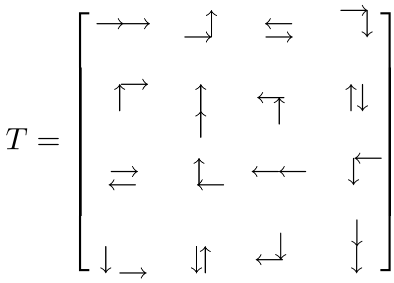
Dönülen açı, eğer yolun geliş ve gidiş doğrultularını takip edersek, her konumda hesaplanabilir. Bu amaçla, her konumda *dışarı giden* 4 doğrultuyu göstermesi için μ indeksini kullanacağız, mesela sağ için, $\mu = 1$, yukarı için $\mu = 2$, sol için $\mu = 3$, aşağı için $\mu = 4$. Sonra, denklem VI.39'u genelleştiren, $4N \times 4N$ matris kümesini

$$\begin{aligned}\langle x_2y_2, \mu_2 \mid W^*(\ell) \mid x_1y_1, \mu_1\rangle = \sum (x_1,y_1)\text{'den } \mu_1 \text{ yönünde ayrılıp, } (x_2,y_2)\text{'ye ulaştıktan sonra } \mu_2\\ \text{yönünde devam eden } U \text{ dönüşsüz, } \ell \text{ adımlı, yönlenmiş rastgele yürüyüşler} \times e^{\frac{i}{2}\sum_{j=1}^{\ell}\theta_j} \qquad \text{(VI.64)}\end{aligned}$$

olarak tanımlarız. Dolayısıyla, μ_2, yürüyücünün hedefine ulaştıktan *sonraki* yönünü belirler. Bazı yolları ($-\mu_2$ yönünden gelen) dışarıda bırakmak gerekir, ve ek fazlara yol açar. Denklem VI.43'teki gibi, Markovian özelliğini kullanarak, bu matrisleri yinelemeli olarak hesaplayabiliriz:

$$\begin{aligned}&\langle x_2y_2, \mu_2 \mid W^*(\ell) \mid x_1y_2, \mu_1\rangle\\ &\quad= \sum_{x'y',\mu'} \langle x_2y_2, \mu_2 \mid T^* \mid x'y', \mu'\rangle\langle x'y', \mu' \mid W^*(\ell-1) \mid x_1y_1, \mu_1\rangle\\ &\quad= \langle x_2y_2, \mu_2 \mid T^*W^*(\ell-1) \mid x_1y_2, \mu_1\rangle = \langle x_2y_2, \mu_2 \mid T^{*\ell} \mid x_1y_1, \mu_1\rangle \qquad \text{(VI.65)}\end{aligned}$$

burada $T^* \equiv W^*(1)$, yürüyüşün tek adımını tasvir eder. Gelme yönü, yürüyücünün ayrıldığı en yakın komşuyu tek olarak belirler, ve iki yön arasındaki açı, matris elemanının fazını sabitler. Dolayısıyla, denklem VI.46'yı 4×4'lük bir matrise, bağlanırlığı ve konum çiftleri arasındaki faza dikkat ederek, genelleştirebiliriz. Adımlar diyagramatik olarak şöyle gösterilebilir:



(VI.66)

ve

$$\langle x'y' \mid T \mid xy\rangle =$$
$$\begin{bmatrix} \langle x',y' \mid x+1,y\rangle & \langle x',y' \mid x+1,y\rangle e^{\frac{i\pi}{4}} & 0 & \langle x',y' \mid x+1,y\rangle e^{-\frac{i\pi}{4}} \\ \langle x',y' \mid x,y+1\rangle e^{-\frac{i\pi}{4}} & \langle x',y' \mid x,y+1\rangle & \langle x',y' \mid x,y+1\rangle e^{\frac{i\pi}{4}} & 0 \\ 0 & \langle x',y' \mid x-1,y\rangle e^{-\frac{i\pi}{4}} & \langle x',y' \mid x-1,y\rangle & \langle x',y' \mid x-1,y\rangle e^{\frac{i\pi}{4}} \\ \langle x',y' \mid x,y-1\rangle e^{\frac{i\pi}{4}} & 0 & \langle x',y' \mid x,y-1\rangle e^{-\frac{i\pi}{4}} & \langle x',y' \mid x,y-1\rangle \end{bmatrix} \quad \text{(VI.67)}$$

matrisine karşılık gelir, burada $\langle x,y \mid x',y'\rangle \equiv \delta_{x,x'}\delta_{y,y'}$.

Öteleme simetrisinden dolayı, $4N \times 4N$ matrisi, $\langle xy \mid q_x q_y\rangle = e^{i(q_x x + q_y y)}/\sqrt{N}$ Fourier bazında *blok köşegenel* bir hal alır, yani

$$\sum_{xy} \langle x'y', \mu' \mid T^* \mid xy, \mu\rangle \langle xy \mid q_x q_y\rangle = \langle \mu' \mid T^*(\mathbf{q}) \mid \mu\rangle \langle x'y' \mid q_x q_y\rangle \quad \text{(VI.68)}$$

Her 4×4 blok, $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ dalga vektörü ile işaretlenmiştir, ve

$$T^*(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} e^{-iq_x} & e^{-i\left(q_x - \frac{\pi}{4}\right)} & 0 & e^{-i\left(q_x + \frac{\pi}{4}\right)} \\ e^{-i\left(q_y + \frac{\pi}{4}\right)} & e^{-iq_y} & e^{-i\left(q_y - \frac{\pi}{4}\right)} & 0 \\ 0 & e^{i\left(q_x - \frac{\pi}{4}\right)} & e^{iq_x} & e^{i\left(q_x + \frac{\pi}{4}\right)} \\ e^{i\left(q_y + \frac{\pi}{4}\right)} & 0 & e^{i\left(q_y - \frac{\pi}{4}\right)} & e^{iq_y} \end{bmatrix} \quad \text{(VI.69)}$$

Orijinden başlayan yolun düzgün bir ilmeği tamamladığından emin olmak için, orijine varış doğrultusu, ilk olanla çakışmalıdır. Bütün böyle 4 yön üzerinden toplarsak, böyle ilmeklerin sayısı

$$\langle \mathbf{0} \mid W^*(\ell) \mid \mathbf{0}\rangle = \sum_{\mu=1}^{4} \langle 00, \mu \mid T^{*\ell} \mid 00, \mu\rangle = \frac{1}{N} \sum_{xy,\mu} \langle xy, \mu \mid T^{*\ell} \mid xy, \mu\rangle = \frac{1}{N} \text{İz}\left(T^{*\ell}\right) \quad \text{(VI.70)}$$

ifadesinden elde edilir. Denklem VI.58'i kullanarak, serbest enerji

$$\begin{aligned} \frac{\ln Z}{N} &= \ln\left(2\cosh^2 K\right) - \frac{1}{2} \sum_{\ell} \frac{t^\ell}{\ell} \langle \mathbf{0} \mid W^*(\ell) \mid \mathbf{0}\rangle = \ln\left(2\cosh^2 K\right) - \frac{1}{2N} \text{İz}\left[\sum_{\ell} \frac{T^{*\ell} t^\ell}{\ell}\right] \\ &= \ln\left(2\cosh^2 K\right) + \frac{1}{2N} \text{İz} \ln(1 - tT^*) \\ &= \ln\left(2\cosh^2 K\right) + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \text{İz} \ln(1 - tT^*(\mathbf{q})) \end{aligned} \quad \text{(VI.71)}$$

olarak hesaplanır. Ancak, özdeğerleri $\{\lambda_\alpha\}$ olan herhangi bir M matrisi için

$$\text{İz} \ln M = \sum_{\alpha} \ln \lambda_\alpha = \ln \prod_{\alpha} \lambda_\alpha = \ln \det M$$

olur. Denklem VI.71'deki $\mathbf{q}$ üzerinden toplamı integrale dönüştürmek

$$\begin{aligned}\frac{\ln Z}{N} &= \ln\left(2\cosh^2 K\right) + \\ &\tfrac{1}{2} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \ln\left\{\det\begin{vmatrix} 1-te^{-iq_x} & -te^{-i(q_x-\frac{\pi}{4})} & 0 & -te^{-i(q_x+\frac{\pi}{4})} \\ -te^{-(q_y+\frac{\pi}{4})} & 1-te^{-iq_y} & -te^{-i(q_y-\frac{\pi}{4})} & 0 \\ 0 & -te^{i(q_x-\frac{\pi}{4})} & 1-te^{iq_x} & -te^{i(q_x+\frac{\pi}{4})} \\ -te^{i(q_y+\frac{\pi}{4})} & 0 & -te^{i(q_y-\frac{\pi}{4})} & 1-te^{iq_y} \end{vmatrix}\right\}\end{aligned} \tag{VI.72}$$

verir. Yukarıdaki determinantın hesabı açıktır, ve sonuç

$$\frac{\ln Z}{N} = \ln\left(2\cosh^2 K\right) + \frac{1}{2}\int \frac{d^d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \ln\left[(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos q_x + \cos q_y)\right] \tag{VI.73}$$

olur. Trigonometrik özdeşlikleri kullanarak, sonuç sadeleştirilerek

$$\frac{\ln Z}{N} = \ln 2 + \frac{1}{2}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} \ln\left[\cosh^2(2K) - \sinh(2K)(\cos q_x + \cos q_y)\right] \tag{VI.74}$$

elde edilir. İntegralleri hesaplayarak kapalı bir ifade elde etmek mümkünse de, son ifade hipergeometrik fonksiyonlar içerir ve daha fazla aydınlatıcı değildir.