Centro de Matemática da Universidade do Porto

Centro de Física do Porto

Curso Livre sobre Teoria do Campo

Aviso... Este texto é provisório e destina-se ao uso dos participantes do Curso Livre. Não reclama qualquer tipo de originalidade e pode conter erros. Agradeço qualquer tipo de crítica ou sugestão.

Modelo de Ising (continuação)

João Nuno Tavares[1]

Índice:

1 Expansão a alta temperatura

O método da chamada **expansão a alta temperatura**, consiste no seguinte - quando T é muito grande, de tal forma que $K = \beta\mathcal{J} = \mathcal{J}/T << 1$, o efeito das interacções entre spins é muito fraco, e podemos usar um método perturbativo que consiste no desenvolvimento de $\mathcal{Z}_N$ como uma série de potências no pequeno parâmetro $K << 1$.

Consideremos de novo o modelo de Ising que, por simplicidade, vamos considerar numa rede quadrada periódica bidimensional, com campo externo nulo ($B = 0$), e função de partição:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_N(\beta) &= \sum_{\phi\in\Omega} e^{-\beta\mathcal{H}(\phi)}\\ &= \sum_{\phi\in\Omega} e^{K\sum_{[\mathbf{ss}']}\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')}\\ &= \sum_{\phi\in\Omega}\prod_{[\mathbf{ss}']} e^{K\,\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')} \qquad (1.1)\end{aligned}$$

Vamos usar a identidade:

$$\begin{aligned}e^{K\,\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')} &= \cosh K + \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')\sinh K\\ &= \cosh K\,\left[1+\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')\,t\right] \qquad (1.2)\end{aligned}$$

[1]Centro de Matemática da Universidade do Porto; jntavar@fc.up.pt; Work supported by *Fundação para a Ciência e a Tecnologia* (FCT) through the *Centro de Matemática da Universidade do Porto* (CMUP). Available as a PDF file from http://www.fc.up.pt/cmup.

onde:

$$t = \tanh K = \tanh \beta \mathcal{J} = \tanh \frac{\mathcal{J}}{T} \tag{1.3}$$

A identidade (1.2) pode ser demonstrada desenvolvendo a exponencial e notando que $\phi(\mathbf{s})^2 = +1$ e portanto:

$$[\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')]^n = \begin{cases} 1 & \text{se } n \text{ é par} \\ \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}') & \text{se } n \text{ é ímpar} \end{cases}$$

Como $t \to 0$ quando $T \to \infty$, optámos por desenvolver $\mathcal{Z}_N$ em potências de t. Usando então a identidade (1.2), podemos escrever $\mathcal{Z}_N$ na forma:

$$\mathcal{Z}_N = (\cosh K)^{2N} \sum_{\phi \in \Omega} \prod_{[\mathbf{ss}']} [1 + \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')\, t] \tag{1.4}$$

já que $2N$ é o número total de pares vizinhos (= número total de interacções).

Para ilustrar a ideia, tomemos provisòriamente um anel de Ising (unidimensioanl), e vejamos qual o aspecto de (1.4), para esse anel com $N = 3$ spins, notados por $1, 2, 3$. Pondo $\phi(i) = \phi_i$, $i = 1, 2, 3$, por simplicidade de notações, vem que:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_3 &= (\cosh K)^3 \sum_{\phi_1=\pm1} \sum_{\phi_2=\pm1} \sum_{\phi_3=\pm1} (1 + \phi_1\phi_2\, t)(1 + \phi_2\phi_3\, t)(1 + \phi_3\phi_1\, t) \\ &= (\cosh K)^3 \sum_{\phi_1=\pm1} \sum_{\phi_2=\pm1} \sum_{\phi_3=\pm1} \Big[1 + (\phi_1\phi_2 + \phi_2\phi_3 + \phi_3\phi_1)\, t + \\ &\quad + (\underbracket{\phi_1\phi_2}\, \underbracket{\phi_2\phi_3} + \underbracket{\phi_1\phi_2}\, \underbracket{\phi_3\phi_1} + \underbracket{\phi_2\phi_3}\, \underbracket{\phi_3\phi_1})\, t^2 + (\underbracket{\phi_1\phi_2}\, \underbracket{\phi_2\phi_3}\, \underbracket{\phi_3\phi_1})\, t^3 \Big] \end{aligned} \tag{1.5}$$

É conveniente estabelecer uma correspondência biunívoca entre cada um dos oito termos que aparecem em (1.5) e um grafo (de Feynman) na rede circular Λ_3, já sugerida pela colocação dos sublinhados em (1.5). Para isso representamos cada produto $\phi_i\phi_j$, correspondente a um par de vértices vizinhos i e j da rede, por uma aresta da rede unindo esses mesmos vértices. Os oito diagramas, correspondentes à expansão (1.5), são os seguintes:

Figure 1:

Como $\phi_i^2 = +1$, nos termos em que aparece uma potência par de um certo ϕ_i, podemos substituir essa potência por 1 e, anàlogamente, nos termos em que aparece uma potência ímpar de um certo ϕ_i, podemos substituir essa potência por ϕ_i. Depois de fazer estas substituições e fazendo agora os somatórios, vemos que apenas os termos de ordem t^0 e t^3 contribuem para a soma. Por outras palavras, apenas os diagramas fechados, isto é, aqueles em que existe um número par de arestas em cada vértice, contribuem para a soma. Portanto a soma (1.5) reduz-se a:

$$\mathcal{Z}_3 = 2^3 (\cosh K)^3 [1 + t^3]$$

Para o anel de Ising com N spins, as únicas contribuições não nulas provêm dos loops "nulos" (os vértices) (0 arestas) e o próprio anel que é único loop com N arestas. Podemos pois escrever a soma (1.5) na forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_N &= 2^N (\cosh K)^N [1 + t^N] \\ &= 2^N (\cosh K)^N \sum_{\{\text{loops}\,\ell\}} (\tanh K)^{|\ell|} \end{aligned} \tag{1.6}$$

onde $|\ell|$ = número de arestas (perímetro) em ℓ.

No caso bidimensional o argumento é exactamente o mesmo e a soma (1.4) pode escrever-se na forma:

$$\boxed{\begin{aligned} 2^{-N} (\cosh K)^{-2N} \mathcal{Z}_{\text{high}}(K) &= \textstyle\sum_{\{\text{loops}\,\ell\}} (\tanh K)^{|\ell|} \\ &= 1 + N\,(\tanh K)^4 + 2N\,(\tanh K)^6 + \\ &\qquad + \tfrac{1}{2} N(N-5)\,(\tanh K)^8 + \cdots \end{aligned}} \tag{1.7}$$

onde a soma se efectua sobre todas as configurações possíveis de loops na rede Λ (possìvelmente desconexos).

As correlações $\langle \phi_{\mathbf{0}} \phi_{\mathbf{r}} \rangle$, também podem ser calculadas usando a expansão a alta temperatura:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\mathbf{0}} \phi_{\mathbf{r}} \rangle &= \mathcal{Z}^{-1} \sum_{\phi \in \Omega} \prod_{[\mathbf{ss}']} \phi(\mathbf{0}) \phi(\mathbf{r}) e^{K\,\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')} \\ &= \mathcal{Z}^{-1} (\cosh K)^{2N} \sum_{\phi \in \Omega} \prod_{[\mathbf{ss}']} \phi(\mathbf{0}) \phi(\mathbf{r}) \left[1 + \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')\, t\right] \end{aligned} \tag{1.8}$$

Como antes, concluímos que, quando desenvolvemos o produto dos factores $[1 + \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')\, t]$, e quando somámos sobre todos os spins vizinhos $[\mathbf{ss}']$, os únicos termos que dão contribuição não nula, são aqueles em que cada spin ocorre um número par de vezes. No entanto, como agora $\phi(\mathbf{0})$ e $\phi(\mathbf{r})$ ocorrem inevitàvelmente pelo menos uma vez, nos sítios $\mathbf{0}$ e $\mathbf{r}$ devem incidir um número ímpar de arestas. Portanto os termos que contribuem podem ser representados por caminhos na rede, unindo $\mathbf{0}$ a $\mathbf{r}$, possìvelmente acompanhados por um ou mais loops adicionais:

$$\langle \phi_{\mathbf{0}} \phi_{\mathbf{r}} \rangle = \mathcal{Z}^{-1}\, 2^N \cosh^{2N} \sum_{\substack{\ell\,:\,\text{caminhos} \\ \text{de } \mathbf{0} \text{ a } \mathbf{r} \,+\, \text{loops}}} [\tanh K]^{|\ell|} \tag{1.9}$$

Os caminhos que unem $\mathbf{0}$ a $\mathbf{r}$ são **auto-exclusivos**[2] - nenhuma aresta da rede pode ser percorrida mais do que uma vez (mas podem ocorrer auto-intersecções) - os que têm comprimento n são os têm a contribuição dominante no termo de ordem n da expansão (1.9).

[2] self-avoiding walks

2 Expansão a baixa temperatura. Dualidade (Kramers-Wannier)

Consideremos de novo o modelo de Ising da secção anterior. Como todos os spins estão alinhados quando $T = 0$, a expansão a baixa temperatura será uma expansão no número de spins desalinhados (flipped spins). Recordemos que a energia de uma configuração é dada por $\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J}\sum_{[\mathbf{ss}']}\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')$. Em particular, a energia do vácuo, é igual a:

$$E_0 = \min_{\{\phi\}} \mathcal{H}(\phi) = -2N\mathcal{J} \tag{2.1}$$

e o seu grau de degenerescência é $n_0 = 2$ (todos os spins $+1$ ou todos -1). Portanto o primeiro termo da função de partição é:

$$n_0 e^{-\beta E_0} = 2e^{2NK}, \qquad K = \beta\mathcal{J} \tag{2.2}$$

O primeiro estado excitado, surge quando um spin é -1 (resp. $+1$) e todos os outros $+1$ (resp. -1). A energia de uma tal configuração é:

$$E_1 = -\mathcal{J}\sum_{[\mathbf{ss}']}\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}') = 4\mathcal{J} - \mathcal{J}(2N-4) = -\mathcal{J}(2N-8) \tag{2.3}$$

já que das $2N$ interações entre spins vizinhos, 4 estão desalinhadas (spins trocados) e as restantes $(2N-4)$ alinhadas. O grau de degenerescência de uma tal configuração é $n_1 = 2N$, e portanto o segundo termo da função de partição é:

$$n_1 e^{-\beta E_1} = 2Ne^{-\beta(-cj(2N-8))} = 2Ne^{K(2N-8)} \tag{2.4}$$

Anàlogamente, o estado excitado seguinte, surge quando dois spins estão desalinhados, digámos iguais a -1 (resp. $+1$) e todos os outros iguais a $+1$ (resp. -1). Neste caso teremos 6 interacções trocadas se esses spins são vizinhos e 8 se não o forem. A energia de cada uma dessas configurações é $6\mathcal{J} - \mathcal{J}(2N-6) = -\mathcal{J}(2N-12)$, no primeiro caso, e $8\mathcal{J} - \mathcal{J}(2N-8) = -\mathcal{J}(2N-16)$, no segundo, e os termos correspondentes na função de partição são:

$$4Ne^{K(2N-12)} + 2\left[\begin{pmatrix} N \\ 2 \end{pmatrix} - 2N\right] e^{K(2N-16)} = 4Ne^{K(2N-12)} + N(N-5)e^{K(2N-16)} \tag{2.5}$$

Portanto os primeiros termos na expansão a baixa temperatura são:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{\text{low}}(K) &= 2e^{2NK} + 2Ne^{K(2N-8)} + 4Ne^{K(2N-12)} + N(N-5)e^{K(2N-16)}\cdots \\
&= 2e^{2NK}\left(1 + Ne^{-8K} + 2Ne^{-12K} + \frac{1}{2}N(N-5)e^{-16K} + \cdots\right)
\end{aligned}$$

isto é:

$$\boxed{2^{-1}e^{-2NK}\mathcal{Z}_{\text{low}}(K) = 1 + Ne^{-8K} + 2Ne^{-12K} + \tfrac{1}{2}N(N-5)e^{-16K} + \cdots} \tag{2.6}$$

(Note que o **salto de energia**[3] é $E_1 - E_0 = 8\mathcal{J}$).

Podemos agora estabelecer uma correspondência entre as duas expansões (1.7) e (2.6), associando a cada loop ℓ, que aparece na expansão a alta temperatura, $\mathcal{Z}_{\text{high}}(K)$, dada por (**??**), uma configuração de spins na rede dual Λ^*, de tal forma que os spins no interior das regiões

Figure 2:

delimitadas pelas componentes de ℓ, sejam todos iguais a $+1$ (resp. -1), e os do exterior todos iguais a -1 (resp. -1):

Mais precisamente, se definirmos K^* através de:

$$e^{-2K^*} = \tanh K \tag{2.7}$$

e se compará rmos (2.6) com (1.7), vemos que:

$$\frac{\mathcal{Z}_{\text{low}}(K^*)}{(e^{2K^*})^N} = \frac{\mathcal{Z}_{\text{high}}(K)}{2^N (\cosh^2 K)^N} \tag{2.8}$$

Manipulando as funções hiperbólicas que surgem em (2.7), podemos escrever essa relação na forma simétrica:

$$\sinh(2K)\sinh(2K^*) = 1 \tag{2.9}$$

e (2.8), na forma:

$$\frac{\mathcal{Z}_{\text{low}}(K^*)}{\sinh^{N/2}(2K^*)} = \frac{\mathcal{Z}_{\text{high}}(K)}{\sinh^{N/2}(2K)} \tag{2.10}$$

Portanto a transformação $K \to K^* = \mathcal{D}(K)$, definida por (2.9), é uma transformação de dualidade:

$$\mathcal{D} \circ \mathcal{D}(K) = K$$

que permuta os regimens de alta e baixa temperatura:

$$K : 0 \to \infty \Leftrightarrow K^* : \infty \to 0$$

Isto implica que as singularidades devem ocorrer aos pares. Em particular, *se existir uma única singularidade*, ela deve ocorrer quando $K = K^*$, e a equação (2.9) fornece então o ponto crítico K_c:

$$\sinh^2(2K_c) = 1 \tag{2.11}$$

ou:

$$K_c = \frac{1}{2}\log(\sqrt{2} + 1) \tag{2.12}$$

que é o ponto crítico da solução de Onsager.

[3] energy gap