

WYBRANE ŚCISŁE WYNIKI STATYSTYCZNEJ MECHANIKI

Semestr letni 2011

Lecture notes

J. W.

1 Wstęp

Spis zagadnień planowanych do poruszenia:

1. Przypomnienie podstawowych pojęć klasycznej mechaniki statystycznej. Pojęcie przejścia fazowego.
2. Nieistnienie przejść fazowych w układach jednowymiarowych. Przykład: Jednowymiarowy model Isinga
3. Przykład przejścia fazowego: Model pola średniego
4. Argument Peierlsa i dowód istnienia spontanicznej magnetyzacji w dwuwymiarowym modelu Isinga
5. Ścisłe rozwiązanie dwuwymiarowego modelu Isinga przy użyciu zmiennych grassmannowskich
6. Przypomnienie podstawowych pojęć kwantowej mechaniki statystycznej.
7. Dowód Mermin-Wagnera nieistnienia uporządkowań dalekiego zasięgu w temperaturach niezerowych w modelach z ciągłą grupą symetrii w wymiarach 1 i 2.
8. Dowód Kubo i Kishi'ego nieistnienia przejść fazowych w modelu Hubbarda w określonym zakresie parametrów.
9. Odbiciowa dodatniość i dowód istnienia uporządkowań dalekiego zasięgu w niskich temperaturach w klasycznym modelu Heisenberga.

2 Wstęp – klasyczna mechanika statystyczna układów sieciowych

2.1 Przestrzeń konfiguracyjna, energia układu

Układy, z którymi będziemy mieli do czynienia:

- Mamy Λ – skończony podzbiór \mathbb{Z}^n , zawierający $N = |\Lambda|$ węzłów. (Model atomów w sieci krystalicznej). (Nie musi to być akurat \mathbb{Z}^n ; zakładamy, że sieć jest periodyczna).
- W każdym węźle sieci i mamy *przestrzeń stanów* i -tego węzła Ω_i . Formalnie uważamy ją za *zwartą przestrzeń metryczną* (czasem i niezwartą), a w praktyce jest to *zbiór dyskretny* lub *rozmaitość* (nie będzie chyba nic tu rozważane poza S^n , lub \mathbb{R} w przypadku niezwartym). (Będziemy rozważać wyłącznie sytuacje, gdy przestrzeń stanów w każdym węźle jest taka sama; ale rozważa się też modele, gdzie na różnych węzłach mogą być różne rodzaje przestrzeni stanów).

W większości modeli tu rozważanych, dyskretną przestrzeń konfiguracyjną zawierającą k elementów zwyczajowo będziemy nazywać *spinem*, tak więc $\Omega_i = \{s_i^1, s_i^2, \dots, s_i^k\}$.

- *Przestrzeń konfiguracyjna* Ω_Λ układu N węzłów jest więc *iloczynem kartezjańskim* N egzemplarzy przestrzeni Ω_i :

$$\Omega_\Lambda = \prod_{i=1}^N \Omega_i$$

Konfigurację (tzn. element przestrzeni Ω_Λ) będziemy oznaczać jako $\{s_1^{i_1}, s_2^{i_2}, \dots, s_N^{i_N}\}$ lub skrótowo $\{s_i\}$.

Uwaga. Jeśli Ω_i jest zbiorem skończonym zawierającym k elementów, to jaka jest ilość stanów przestrzeni konfiguracyjnej N spinów? Z kombinatoryki przypominamy sobie, że $\Omega_N = k^N$, tak więc ilość stanów rośnie *wykładniczo* z rozmiarem układu.

- Na przestrzeni konfiguracyjnej jest określona funkcja zwana hamiltonianem, przypisująca każdej konfiguracji $\{s_i\}$ jej *energię* $H(\{s_i\})$.

Przykłady.

1. Model Isinga, spin $\frac{1}{2}$: Każdy spin przyjmuje dwie wartości: $s_i \in \{+1, -1\}$ (zamiast Ω_i piszemy s_i). Zakładamy, że spiny i, j oddziałują między sobą oddziaływaniami dwuciałowymi $s_i s_j$; ich oddziaływanie charakteryzowane jest stałą sprzężenia J_{ij} . Prócz tego spiny oddziałują z zewnętrznym polem magnetycznym B . Niech $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$; dla ustalenia uwagi, niech to będzie d -wymiarowy sześcian. Mamy więc hamiltonian:

$$H_\Lambda^{\text{Is}} = \sum_{i,j \in \Lambda} J_{ij} s_i s_j - B \sum_{i \in \Lambda} s_i \quad (1)$$

Model Isinga możemy uważać za (prymitywny) model magnetyka. Gdy np. chcemy opisać *ferromagnetyki*, to bierzemy wszystkie $J_{ij} < 0$. W ten sposób:

$$E(\uparrow\uparrow) = E(\downarrow\downarrow) < 0, \quad E(\uparrow\downarrow) = E(\downarrow\uparrow) > 0$$

, czyli uprzywilejowane energetycznie jest *równoległe* ustawianie spinów; gdy takie uporządkowanie będzie obecne w całej próbce, to otrzymamy wypadkowe niezerowe namagnesowanie.

2. *Model XY, model Heisenberga.* Dla modelu XY, spin przyjmuje wartości w S^1 (wektor o ustalonej długości może swobodnie obracać się w płaszczyźnie); dla modelu Heisenberga, spin przyjmuje wartości w S^2 . Zakładamy, że oddziaływanie pomiędzy spinami jest dwuciałowe i dane jest przez $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$. Hamiltoniany w obu przypadkach dane są wzorami:

$$H_\Lambda = \sum_{i,j \in \Lambda} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \vec{B} \cdot \sum_{i \in \Lambda} \vec{s}_i$$

(tu $\vec{a} \cdot \vec{b}$ jest standardowym iloczynem skalarnym).

Formalizm – cd.

- *Sumą statystyczną* (określoną na przestrzeni stanów układu) nazywamy wielkość

$$Z_\Lambda = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H(\{s_i\})},$$

gdzie β jest odwrotnością temperatury:

$$\beta = \frac{1}{kT}, \quad (k - \text{stała Boltzmannna}).$$

- *Związek mechaniki statystycznej z termodynamiką:* Mając sumę statystyczną Z_Λ , obliczaną z własności *mikroskopowych* modelu, otrzymujemy *energię swobodną* układu F_Λ , która jest wielkością *makroskopową*:

$$-\beta F_\Lambda = \ln Z_\Lambda; \quad f_\Lambda = \frac{1}{|\Lambda|} F_\Lambda.$$

(tu f_Λ jest energią swobodną na jeden spin). Z energii swobodnej, przez różniczkowanie po parametrach, otrzymujemy inne funkcje termodynamiczne (jeden sposób – zaraz będzie drugi).

- *Interpretacja probabilistyczna sumy statystycznej:*

Prawdopodobieństwo znalezienia układu w stanie, który jest konfiguracją $\{s_i\}$ o energii $E = H(\{s_i\})$, jest równe

$$P(\{s_i\}) = \frac{e^{-\beta E}}{Z_\Lambda}$$

- *Wartość średnia* wielkości obserwowalnej X (magnetyzacja, energia wewnętrzna...) jest równa:

$$\langle X \rangle_\Lambda = \sum_{\{s_i\}} X(\{s_i\}) \frac{e^{-\beta H(\{s_i\})}}{Z_\Lambda} \equiv \frac{1}{Z_\Lambda} \sum_{\{s_i\}} X e^{-\beta H}$$

(czyli: Mając konfigurację $\{s_i\}$, liczymy wartość wielkości X dla tej konfiguracji i mnożymy ją przez prawdopodobieństwo wystąpienia $\{s_i\}$; a potem sumujemy).

Przykłady. Drugi sposób liczenia średnich: energia wewnętrzna U i magnetyzacja M .

Energia wewnętrzna:

$$U_\Lambda = \langle H \rangle_\Lambda = \frac{1}{Z_\Lambda} \sum_{\{s_i\}} H e^{-\beta H}$$

$$= \frac{1}{Z_\Lambda} (-) \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H} = -\frac{1}{Z_\Lambda} \frac{\partial}{\partial \beta} Z_\Lambda = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_\Lambda = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_\Lambda) = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right)$$

bo: $\beta = \frac{1}{kT}; T = \frac{1}{k\beta}; \frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{dT}{d\beta} \frac{\partial}{\partial T} = -\frac{1}{k\beta^2} \frac{\partial}{\partial T} = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T}$

Magnetyzacja:

Zapiszmy najspierw Ham'a układów magnetycznych w postaci dostatecznie ogólnej:

$$H = \sum_I J_I s^I - B \sum_i s_i \equiv \sum_I J_I s^I - BM;$$

tu B jest polem magnetycznym, zaś I – *wielowskaźnikiem*, oznaczającym podzbiory Λ : $I = \{i_1, i_2, \dots, i_n\}$, zaś $s^I = s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_n}$ (oddziaływania n -spinowe). I tak np. dla modelu Isinga zbiór wszystkich I jest zbiorem wszystkich par (i, j) , natomiast J_I to zbiór wszystkich J_{ij} . Wreszcie M jest *magnetyzacją*, którą definiujemy jako: Dla jakiejś konfiguracji $\{s_i\}$,

$$M = \sum_{i \in \Lambda} s_i.$$

Liczymy teraz średnią:

$$\begin{aligned} \mathcal{M} = \langle M \rangle_\Lambda &= \frac{1}{Z_\Lambda} \sum_{\{s_i\}} M e^{-\beta H} = \sum_{\{s_i\}} M e^{-\beta \sum_I J_I s^I + \beta B M} \\ &= \frac{1}{Z_\Lambda} \frac{1}{\beta} \frac{\partial Z_\Lambda}{\partial B} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z_\Lambda = -\frac{\partial F_\Lambda}{\partial B}. \end{aligned}$$

- *Granica termodynamiczna:* Energia swobodna:

$$f = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} f_\Lambda,$$

i średnie obserwabli:

$$\langle X \rangle = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \langle X \rangle_\Lambda$$

Motywacja. Typowe układy makroskopowe mają ok. 10^{23} atomów bądź cząsteczek (rzędu liczby Avogadra). Z matematycznego punktu widzenia, do nieskończoności jest jednakowo daleko od 1 jak od 10^{23} ; ale z fizycznego punktu widzenia, 10^{23} jest bliższa nieskończoności niż jedynce. Mamy więc nadzieję, że badając granicę termodynamiczną, z dobrym przybliżeniem powiemy o własnościach układów badanych doświadczalnie.

Uwaga. Nasuwają się tu od razu pytania: Kiedy granica termodynamiczna istnieje? Bardziej szczegółowo: Jakie warunki muszą spełniać stałe oddziaływania w układzie, aby granica TD istniała? W jaki sposób dążyć z Λ do nieskończoności?

Te problemy nie będą tu dyskutowane. Wykładowca poprzestanie na stwierdzeniu, że:

Stw. Dla rozsądnych (tzn. malejących dostatecznie szybko z odległością) postaci oddziaływań w układzie; oraz dla $\{\Lambda_n\}$ będących np. ciągiem sześcianów, granica termodynamiczna istnieje.

Uwaga. Dowodzi się też innych, bardzo ważnych własności, np. *wypukłości* energii swobodnej jako funkcji parametrów. Jest to własność bardzo ważna, bo oznacza ona *stabilność* termodynamiczną układu, z której wynika np. nieujemność ciepła właściwego. Wypukłość f w termodynamice się *postuluje*, a w mechanice statystycznej można ją *udowodnić*.

2.2 Jak zdefiniować przejście fazowe?

Przejście fazowe przejawia się *nieciągłością* obserwabli termodynamicznych przy zmianie parametrów. Jako przykład weźmy magnetyzację ferromagnetyka M jako funkcję pola magnetycznego B w różnych temperaturach: $T > T_c$ **RYS.A**, $T = T_c$ **RYS.B** i $T < T_c$ **RYS.C**; see also **RYS.D**. Tę (i inne) sytuacje formalizujemy mówiąc, że

Def. Przejście fazowe definiuje się jako *nieanalityczność* wielkości termodynamicznych (energia swobodna, magnetyzacja, ciepło właściwe...) rozważanych jako funkcje parametrów termodynamicznych (pole magnetyczne, temperatura...)

Przejście fazowe jest na ogół związane ze *spontanycznym złamaniem symetrii*:

W układzie występuje przejście fazowe, gdy występuje tam spontaniczne złamanie symetrii: stan równowagi ma mniejszą symetrię niż hamiltonian – jest tam obecny 'parametr porządku'.

Ilustracja dla modelu Isinga: -) Niezmienniczość względem odbicia – symetria Z_2 ; -) spontaniczna magnetyzacja równa 0 dla $T > T_c$, (układ ma taką sym. jak Ham.) -) spontaniczna magnetyzacja różna od 0 dla $T < T_c$ (układ ma mniejszą sym. niż Ham)

Unik – nie będzie tu dokładniejszych definicji: Grupy symetrii; stanu; fazy; niezmienniczości Ham'a i stanu wzgl. gr. symetrii

Ważny fakt. Dla *skończonych* układów, energia swobodna jest *analityczną* funkcją parametrów.

Wersja ograniczona – dla (say, 2d nn) modelu Isinga: Niech $x = e^{-2\beta J}$; dla $\beta \in]0, \infty[$, $x \in]0, 1[$. Suma statystyczna układu N spinów (układ prostokątny o periodycznych warunkach brzegowych) jest *wielomianem* (stopnia $2N$) w zmiennej x , o współczynnikach *dotatnich*:

$$Z_N = 2x^{-N}(1 + A_4x^4 + A_6x^6 + \dots + x^{2N})$$

(A_k jest ilością wieloboków o k bokach). Suma stat. czyli wielomian jest więc *dotatnia* w całym zakresie temperatur, a energia swobodna czyli logarytm Z_N jest *analityczna* w zmiennej x , a więc i temperaturze (złożenie trzech funkcji analitycznych).

Tak więc przejść fazowych można szukać tylko *w granicy termodynamicznej*.

Dlaczego tam może wystąpić nieanalityczność? Rozszerzmy zakres x , aby przyjmowało wartości *zespolone*. Spójrzmy na zera wielomianu $Z_N(x)$. Dla skończonego N wielomian ten może mieć tylko zera zespolone – będąc dodatni, nie może mieć zer rzeczywistych. Ale okazuje się, że im większe N , tym bliżej osi rzeczywistej mogą się znajdować zera tego wielomianu. *W granicy* $N \rightarrow \infty$, zera *mogą* się znaleźć na osi rzeczywistej; dokładniej, podchodzą tym bliżej osi rzeczywistej, im większe jest N . Okazuje się, że w takiej sytuacji może pojawić się nieanalityczność energii swobodnej. Niewiele jest modeli, dla których to dokładniej zbadano; jednym z nich jest 2d model Isinga.

Teraz zbadamy dwa proste modele, z których jeden *nie* wykazuje przejścia fazowego, a w drugim przejście fazowe jest. Modele te są ściśle rozwiązywalne (aczkolwiek jeden jest nieco niefizyczny) i badanie (nie)istnienia przejścia fazowego pokażemy przez zbadanie sumy statystycznej i innych wielkości termodynamicznych.

2.3 Zadania

1. Wyprowadzić, jak wiąże się pojemność cieplna z pierwszym i drugim momentem energii.
2. Wyprowadzić, jak wiąże się podatność magnetyczna z pierwszym i drugim momentem magnetyzacji.

3. Wyprowadzić ręcznie, jak wiąże się 3. i 4. pochodna f po B z momentami magnetyzacji (do 4. włącznie)
4. Uzbrowiwszy się w jakiś program do obliczeń symbolicznych (np. MathematicaTM, MapleTM) policzyć związek między k -tą pochodną f po B z momentami magnetyzacji do rzędu k dla k do 10.

3 Jednowymiarowy model Isinga i brak przejść fazowych w układach (quasi-)jednowymiarowych

Jednowymiarowy model Isinga to szczególny przypadek Ham'a (1), a konkretnie, jest to łańcuch N węzłów; w każdym węźle siedzi jeden spin. Założymy tu, że:

- i)* mamy tu do czynienia z ferromagnetycznym oddziaływaniem między najbliższymi sąsiadami (tzn. $J < 0$),
- ii)* mamy nałożone periodyczne warunki brzegowe, tzn. między spinem 1 a N również mamy oddziaływanie J .

(Model Isinga można też rozwiązać w ogólniejszych sytuacjach, kiedy mamy oddziaływania również z dalszymi sąsiadami, oraz gdy inne są warunki brzegowe; rachunki wtedy są jednak bardziej skomplikowane).

Ham 1d FM modelu Isinga z p.b.c. jest więc

$$H_N = J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - B \sum_{i=1}^N s_i + J s_1 s_N \quad (2)$$

Uwagi historyczne. 'Jak sama nazwa wskazuje', model Isinga został zaproponowany przez Lenza (tego od reguły Lenza). (Niektórzy bardziej oddają sprawiedliwość historyczną, nazywając ten model *modelem Lenza-Isinga*). Ising był jego doktorantem i tematem jego pracy doktorskiej było rozwiązanie jednowymiarowego wariantu modelu. Ising znalazł ścisłe rozwiązanie jednowymiarowego modelu i – uprzedzając nieco wypadki – okazało się, że jednowymiarowy model nie wykazuje przejścia fazowego. W tej sytuacji – tzn. praktycznego braku innych ścisłych rozwiązań – pojawiło się pytanie, czy mechanika statystyczna jest w stanie opisać przejścia fazowe i spontaniczne łamanie symetrii. Na Kongresie Solvaya (w roku chyba 1933) zadano to pytanie uczestnikom. Większość odpowiedziała, że mechanika statystyczna jest w stanie opisać przejścia fazowe; przewaga głosów za 'tak' była jednak niewielka. Sytuacja zmieniła się w r. 1936, kiedy pojawiła się praca Peierlsa, gdzie udowodnił on istnienie przejścia fazowego w *dwuwymiarowym* modelu Isinga.

3.1 Macierz przejścia

Rozwiązywanie modelu Isinga zacznijmy od przepisania Hama (2) w postaci

$$H_N = \sum_{i=1}^{N-1} (J s_i s_{i+1} - \frac{1}{2} B (s_i + s_{i+1})) + J s_1 s_N - \frac{1}{2} B (s_N + s_1) \equiv \sum_{i=1}^{N-1} h(s_i, s_{i+1}) + h(s_N, s_1) \quad (3)$$

(wyżej oznaczyliśmy: $h(s_i, s_{i+1}) = J s_i s_{i+1} - \frac{1}{2} B (s_i + s_{i+1})$). Wypiszmy teraz sumę statystyczną:

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{s_1=\pm 1, s_2=\pm 1, \dots, s_n=\pm 1} \exp(-\beta(h(s_1, s_2) + h(s_2, s_3) + \dots + h(s_N, s_1))) \\ &= \sum_{s_1=\pm 1, s_2=\pm 1, \dots, s_n=\pm 1} e^{-\beta h(s_1, s_2)} \cdot e^{-\beta h(s_2, s_3)} \dots e^{-\beta h(s_N, s_1)} \end{aligned} \quad (4)$$

Powyższe wyrażenie skojarzmy z następującym faktem algebraicznym. Napiszmy wyrażenie na ślad kwadratu jakiejś macierzy A :

$$\text{Tr}(A^2) = \sum_{i,j} A_{ij} A_{ji};$$

teraz na ślad trzeciej potęgi:

$$\mathrm{Tr}(A^3) = \sum_{i,j,k} A_{ij}A_{jk}A_{ki} \equiv \sum_{i_1,i_2,i_3} A_{i_1i_2}A_{i_2i_3}A_{i_3i_1};$$

itd., i teraz na ślad A^N :

$$\mathrm{Tr}(A^N) = \sum_{i_1,i_2,\dots,i_N} A_{i_1i_2}A_{i_2i_3} \dots A_{i_{N-1}i_N}A_{i_Ni_1}.$$

Patrząc na wyrażenie na sumę statystyczną (4) widzimy, że jest ona *śladem N -tej potęgi macierzy T* , gdzie

$$T(s_1, s_2) = e^{-\beta h(s_1, s_2)}. \quad (5)$$

(jest to macierz 2×2 , bo każdy ze wskaźników s_1, s_2 przyjmuje dwie wartości ± 1). Wypiszmy jawnie elementy macierzowe otrzymanej dopiero co macierzy przejścia:

$$T(+, +) = e^{-\beta J} e^{\beta B}; \quad T(+, -) = T(-, +) = e^{\beta J}; \quad T(-, -) = e^{-\beta J} e^{-\beta B}. \quad (6)$$

Mamy więc

$$Z_N = \mathrm{Tr}(T^N), \quad (7)$$

gdzie macierz T jest zadana wzorami (6).

Uwaga. Macierz przejścia dla drabinki Isinga lub, ogólniej, układu o geometrii prostokąta $M \times N$, gdzie M jest ustalone, zaś N może być dowolnie duże. Tu macierz przejścia ma wymiar $2^M \times 2^M$, zaś suma statystyczna wynosi $Z_{M,N} = \mathrm{Tr}T^N$.

3.2 Energia swobodna

Możemy teraz sumę statystyczną bardzo prosto wyliczyć. Mianowicie ślad macierzy jest *niezmiennikiem transformacji podobieństwa*; doprowadzając więc macierz do postaci diagonalnej, mamy w bazie własnej

$$Z_N = \mathrm{Tr}(T^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N,$$

gdzie λ_1, λ_2 są wartościami własnymi macierzy T . Korzystając z jawnego przedstawienia (6) macierzy T , mamy

$$\lambda_{1,2} = e^{-\beta J} \left(\cosh \beta B \pm \sqrt{\cosh^2 \beta B - (1 - e^{4\beta J})} \right). \quad (8)$$

(dla $B = 0$, mamy: $\lambda_1 = 2 \cosh \beta J$, $\lambda_2 = 2 \sinh \beta J$).

Ile wynosi energia swobodna? Otóż:

$$-\beta f_N = \frac{1}{N} \ln Z_N = \frac{1}{N} \ln(\lambda_1^N + \lambda_2^N) = \ln \lambda_1 + \ln \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right), \quad (9)$$

zaś $f = \lim_{N \rightarrow \infty} f_N$. Zwróćmy uwagę, że jeśli $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} < 1$, to $\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N = 0$, zatem ostatni człon w (9) *znika* i zostaje

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} f_N = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_1 = J - \frac{1}{\beta} \ln \left[\cosh \beta B + \sqrt{\cosh^2 \beta B - (1 - e^{4\beta J})} \right] \quad (10)$$

tzn. do energii swobodnej w granicy termodynamicznej wchodzi jedynie *największa* wartość własna.

Dla $B = 0$ mamy

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh \beta J)$$

Uwaga. Powyższa sytuacja (tzn. że $-\beta f = \ln \lambda_{\max}$ w granicy TD) zachodzi również w *dowolnym* przypadku, gdy wymiar macierzy przejścia jest skończony, a pozostałe wartości własne są mniejsze od λ_{\max} .

3.3 Przejście fazowe a raczej jego brak

Co z istnieniem przejścia fazowego? Patrząc na wyrażenie na λ_{\max} widzimy, że w fizycznym zakresie parametrów, tzn. $\beta \in]0, \infty[$ oraz $B \in]-\infty, \infty[$, λ_{\max} jest *analityczną* funkcją parametrów (bo \cosh , \exp są analityczne zawsze, zaś \ln , $\sqrt{\quad}$ są analityczne, gdy ich argument jest większy od zera, a tu tak właśnie jest). Zatem *w jednowymiarowym modelu Isinga nie ma przejścia fazowego.*

3.4 Energia wewnętrzna, magnetyzacja

Skoro policzyliśmy już energię swobodną, to policzmy też niektóre funkcje termodynamiczne, aby zorientować się, jak wygląda fizyka modelu Isinga.

Weźmy **energię wewnętrzną** dla $B = 0$:

$$u = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta} = -\frac{\partial(\beta \ln(2 \cosh \beta J))}{\partial \beta} = -J \tanh \beta J.$$

Wykres (dla $J = -1$) zilustrowano na **RYS.** Widać, że dla dużych β (temperatura niska) energia wewnętrzna dąży do -1 , bo większość wkładu do sumy statystycznej pochodzi od stanu podstawowego. Z kolei dla β bliskich zeru (tzn. wysokiej temperatury), energia wewnętrzna jest bliska zeru, bo energia oddziaływania między spinami jest niewielka w porównaniu z 'energiami drgań termicznych', spiny praktycznie nie oddziałują, są poukładane chaotycznie i średnio tyleż jest par spinów zwróconych równolegle co antyrównolegle.

Magnetyzacja:

$$m = -\frac{\partial f}{\partial B} = \frac{\sinh \beta B}{\sqrt{\cosh^2 \beta B - (1 - e^{4\beta J})}}; \quad (11)$$

widać, że w skończonej temperaturze, magnetyzacja jest zawsze równa zeru dla $B = 0$ – co jest kolejnym przejawem braku przejścia fazowego.

Wykresy $m(B)$ dla trzech różnych temperatur przedstawiono na **RYS. RYS. RYS.;** widać, że magnetyzacja $m(B)$ zachowuje się w sposób typowy dla paramagnetyka.

3.5 Funkcje korelacji

Sporo użytecznych informacji fizycznych tkwi w *funkcjach korelacji*. Są one różnymi kombinacjami średnich iloczynów spinów: n –punktowa funkcja korelacji to $\langle s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_n} \rangle$. Tu wyliczymy i zbadamy *dwupunktową funkcję korelacji*, a uprzednio jeszcze jednopunktową. Ale jednopunktowa funkcja korelacji $\langle s_i \rangle$ to – z translacyjnej niezmienniczości przy periodycznych warunkach brzegowych – to po prostu *magnetyzacja* (na jeden spin), na którą

już mamy gotowy wzór. Ale wyliczmy ją nieco inaczej. Z translacyjnej niezmienniczości, możemy wyliczyć średnią *dowolnego* spinu i dostaniemy to samo; weźmy więc $\langle s_1 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle s_1 \rangle &= \frac{1}{Z_N} \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} s_1 T(s_1, s_2) \dots T(s_{N-1}, s_N) T(s_N, s_1) \\ &= \frac{1}{Z_N} \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N, s_{N+1}} s_1 \delta(s_1, s_{N+1}) T(s_{N+1}, s_2) \dots T(s_{N-1}, s_N) T(s_N, s_1); \end{aligned} \quad (12)$$

rozpoznamy teraz w macierzy $s_1 \delta(s_1, s_{N+1})$ *macierz Pauliego* $\sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$, a będziemy mieli

$$\langle s_1 \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(\sigma_3 T^N).$$

Analogicznie przekonajmy się, że

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(T^i \sigma_3 T^{j-i} \sigma_3 T^{N-j}) = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(\sigma_3 T^{j-i} \sigma_3 T^{N-j}). \quad (13)$$

Ślady powyższe powyliczamy przechodząc do bazy, w której T jest diagonalna. Niech S będzie macierzą diagonalizującą T , tzn.

$$STS^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$$

S jest macierzą *ortogonalną* i w dwóch wymiarach jest ona obrotem:

$$S = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}$$

gdzie kąt ϕ konkretnie jest dany przez:

$$\text{ctg } 2\phi = e^{-2\beta J} \sinh \beta B. \quad \phi \in]0, \frac{\pi}{2}[\quad (14)$$

Tu krótki rachunek.

Bezpośrednio liczy się, że

$$S\sigma_3 S^{-1} = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos 2\phi & \sin 2\phi \\ \sin 2\phi & -\cos 2\phi \end{bmatrix}$$

Licząc teraz jednopunktową funkcję korelacji, mamy, wykorzystując (12)

$$\begin{aligned} \langle s_i \rangle &= \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left(\begin{bmatrix} \cos 2\phi & \sin 2\phi \\ \sin 2\phi & -\cos 2\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{bmatrix} \right) = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \begin{bmatrix} \lambda_1^N \cos 2\phi & \dots \\ \dots & -\lambda_2^N \cos 2\phi \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{Z_N} \cos 2\phi (\lambda_1^N - \lambda_2^N) = \cos 2\phi + \mathcal{O} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \end{aligned}$$

W ten sposób dostaliśmy alternatywne wyprowadzenie wzoru (11) na magnetyzację.

Nieco bardziej skomplikowane jest wyliczenie $\langle s_i s_j \rangle$. Sprowadza się on jednak tylko do policzenia iloczynu czterech macierzy. Oznaczając $k = i - j$ we wzorze (13), mamy

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left(\begin{bmatrix} \cos 2\phi & \sin 2\phi \\ \sin 2\phi & -\cos 2\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1^k & 0 \\ 0 & \lambda_2^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos 2\phi & \sin 2\phi \\ \sin 2\phi & -\cos 2\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1^{N-k} & 0 \\ 0 & \lambda_2^{N-k} \end{bmatrix} \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{Z_N} \left(\lambda_1^N \cos^2 2\phi + (\lambda_1^{N-k} \lambda_2^k + \lambda_1^k \lambda_2^{N-k}) \sin^2 2\phi + \lambda_2^N \cos^2 2\phi \right) \\
&= \cos^2 2\phi + \sin^2 2\phi \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k + \mathcal{O} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{N-k};
\end{aligned}$$

w ostatniej równości założyliśmy, że $N \gg k$, bo chcemy przejść do granicy TD. Rozpatrzmy teraz *dwupunktową funkcję korelacji* $G(k)$:

$$\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \equiv G_2(k) = \sin^2 2\phi \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k + \dots;$$

zatem w granicy TD:

$$G_2(k) = \sin^2 2\phi \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k,$$

i ponieważ (dla $T > 0$) mamy: $\lambda_1 > \lambda_2$, to widać, że funkcja korelacji maleje *wykładniczo* z odległością:

$$G(k) \sim \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \sim e^{k \ln \frac{\lambda_2}{\lambda_1}} \sim e^{-\frac{k}{\xi}},$$

gdzie

$$\xi^{-1} = \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2}. \quad (15)$$

Uwaga. Przy przejściach fazowych, w punkcie krytycznym długość korelacji rośnie do nieskończoności (zależność korelacji od odległości zmienia charakter z wykładniczego na potęgowy). W jednowymiarowym modelu Isinga długość korelacji jest zawsze *skończona*, co jest kolejnym przejawem tego, że nie ma tu przejścia fazowego (w skończonej temperaturze).

Ale: Zobaczmy, co się dzieje, gdy temperatura dąży do zera. Dla zerowego pola magnetycznego, mamy:

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \text{cth}(-\beta J) \approx 1 + 2e^{2\beta J},$$

tak więc

$$\xi^{-1} \approx 2e^{2\beta J} \quad \text{dla } |\beta J| \gg 1,$$

czyli przy obniżaniu temperatury do zera, długość korelacji dąży do nieskończoności; w tym sensie możemy mówić o przejściu fazowym w zerowej temperaturze.

3.6 Brak przejść fazowych w układach (quasi)jednowymiarowych

Widzieliśmy dopiero co, że w jednowymiarowym modelu Isinga *nie ma* przejścia fazowego w skończonej temperaturze. Okazuje się, że jest to *typowe* zjawisko dla układów jednowymiarowych, lub quasi-jednowymiarowych (Λ jest takim podzbiorem \mathbb{R}^d , że w jednym kierunku może mieć dowolną długość, a w pozostałych średnica jest ograniczona). Mamy:

Tw. W układach 1d (quasi-1d) z oddziaływaniem o skończonym zasięgu, i ze skończoną liczbą stanów na jednym węźle, i gdzie hamiltonian zależy analitycznie od parametrów (pole magnetyczne, stałe sprzężenia...), *nie ma* przejścia fazowego w skończonych temperaturach.

Dow. Ograniczymy się tu do sytuacji, gdy macierz przejścia jest *symetryczna*. Nie zawsze da się tak zrobić; ogólny przypadek dla macierzy niesymetrycznej opisany jest w książce Simona.

W obu przypadkach (macierzy symetrycznej i nie) dowód jest oparty na *twierdzeniu Perrona – Frobeniusa*, które mówi, że

Tw. Perrona – Frobeniusa. Niech T będzie macierzą rzeczywistą o elementach *dodatnich*. Wtedy największa wartość własna T jest niezdegenerowana.

Dow. będzie dla macierzy *symetrycznych*.

Ponieważ macierz T jest dodatnia, to λ_{\max} też jest dodatnia. (Bo: $\lambda_{\max} = \max_{v: \|v\|=1} (v, Tv)$).

Weźmy wektor próbny v^t składający się z samych jedynek. Mamy: $\lambda_{\max} \geq (v^t, Tv^t) = \frac{1}{n} \sum_{i,j} T_{ij} > 0$.

Niech wektor własny v^* odpowiadający największej wartości własnej λ_{\max} posiada składowe dodatnie, zerowe i ujemne. λ_{\max} jest *formą kwadratową*:

$$\lambda_{\max} = (v^*, Tv^*) = \sum_{i,j} T_{ij} v_i^* v_j^*$$

Zauważamy, że wartość tej formy może jedynie *wzrosnąć*, gdy zmienimy znaki ujemnych składowych na dodatnie. (Gdy spotkają się dwa minusy, bądź dwa plusy, to nic się nie dzieje. Gdy spotkają się plus z minusem, to iloczyn $T_{ij} v_i^* v_j^*$ zmienia znak z ujemnego na dodatni). Zatem wektor v^* może mieć jedynie składowe dodatnie lub zerowe.

Składowe wektora v^* nie mogą jednak być zerowe. Weźmy bowiem i -tą składową równości $Tv^* = \lambda_{\max} v^*$; mamy: $v^i = \frac{1}{\lambda_{\max}} \sum_j T_{ij} v_j^*$. Wszystkie elementy T_{ij} są dodatnie, więc suma $T_{ij} v_j^*$ też jest dodatnia – chyba że wszystkie składowe wektora v^* są zerowe, ale to niemożliwe, bo wiemy, że istnieje nietrywialny wektor v^* .

Teraz: Każdy wektor własny odpowiadający dowolnej innej wartości własnej musi być ortogonalny do v^* (ew. po ortogonalizacji). Gdyby więc λ_{\max} była zdegenerowana, to istniałby inny wektor własny $v^{*'}$ odpowiadający jej, i ortogonalny do v^* . Tak jednak być nie może, bo $v^{*'}$ również musi mieć wszystkie składowe dodatnie i $(v^*, v^{*'}) > 0$.

□ P-F

Uwaga. Dowód (tw. P-F) dla przypadku niesymetrycznego jest bardziej skomplikowany, bo nie można tam korzystać z tw. spektralnego dla macierzy symetrycznych, z którego kilkakrotnie zrobiliśmy użytek powyżej.

c.d. dow. o nieistnieniu przejścia fazowego. Niedawno zobaczyliśmy, że $f = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_{\max}$, i ponieważ $\lambda_{\max} > 0$, wystarczy zbadać jedynie analityczność λ_{\max} . Elementy macierzy przejścia zależą analitycznie od parametrów i temperatury, więc analitycznie zależą od parametrów też współczynniki równania charakterystycznego, którego rozwiązaniem jest λ_{\max} . Ale pokazaliśmy dopiero co, że λ_{\max} jest *jednokrotną* wartością własną, tzn. *jednokrotnym* pierwiastkiem równania charakterystycznego; a mamy

fakt. takie pierwiastki zależą *analitycznie* od współczynników równania charakterystycznego. (Bo: Zapiszmy równanie charakterystyczne: $t_0 + t_1 \lambda + \dots + t_n \lambda^n \equiv F(t_0, t_1, \dots, t_n; \lambda) = 0$. Z twierdzenia o funkcji uwikłanej mamy, że jeżeli $F'_\lambda(t_0, t_1, \dots, t_n, \lambda_{\max}) \neq 0$, to $\lambda_{\max}(t_0, \dots, t_n)$ zależy analitycznie od t_0, \dots, t_n).

Morał: Zależność λ_{\max} od parametrów jest analityczna, nie ma więc przejścia fazowego.

□ braku p.f. w ukł. 1d

Uwaga. Istotne wśród założeń jest to, że wymiar macierzy przejścia jest skończony. Gdy tak nie jest, to nie można stosować tw. PF i *może* się pojawić nieanalityczna zależność od parametrów, a więc i przejście fazowe. Jest tak np. jednowymiarowym modelu Isinga z dalekozasięgowym oddziaływaniem proporcjonalnym do $\frac{1}{|i-j|^2}$, oraz w pasku Isinga o szerokości dążącej do nieskończoności.

3.7 Jeszcze raz o braku przejść fazowych w układach jednowymiarowych

'Niels Bohr powiedział kiedyś, że nigdy nie uznał myśli filozoficznych za zrozumiałe, zanim nie przedyskutował ich sam w językach: niemieckim, angielskim, francuskim, jak i ojczystym duńskim'

(cyt. za: Byron, Fuller, Matematyka w fizyce klasycznej i kwantowej).

Zgodnie z tą dewizą, przyjrzyjmy się z innego punktu widzenia faktowi, który już na 3 sposoby poznaliśmy – tzn. że w jednowymiarowym modelu Isinga nie ma przejścia fazowego.

Rozpatrzmy stan podstawowy układu ferromagnetycznego. (N spinów; warunki brzegowe z *ustalonymi* spinami na brzegach, np. spiny niech będą zwrócone w górę). Wtedy stanem podstawowym układu będzie stan, gdzie wszystkie spiny będą zwrócone w górę. Energia takiego stanu wynosi: $E_{g.s.} = -NJ$. Rozważmy teraz stany wzbudzone o najniższej energii. Każdy taki stan wzbudzony ma *dwie* pary spinów o przeciwnym znaku. Energia takiego stanu wynosi: $E_{1.exc.} = -NJ + 2J$. A ile wynosi *magnetyzacja* takiego stanu? Otóż może być *dowolna* (w zakresie od $-(N - 4)$ do $N - 4$). Tak więc w sumie statystycznej, najniższe stany wzbudzone ponad uporządkowany stan podstawowy mogą mieć *dowolną* magnetyzację. Fakt ten można wypowiedzieć obrazowo, że *wzbudzenia termiczne niszczą uporządkowanie*.

(W powyższej wersji argument ma jedynie wartość heurystyczną; ale można go uściślić).

Uwaga. W $d = 2$ sytuacja jest już inna: *nie ma* stanów niskowzbudzonych o dowolnie dużej przeciwnej magnetyzacji; jeżeli stan ma niską energię, to ma też małą magnetyzację – co powoduje, że w niskiej temperaturze możemy się spodziewać, iż układ ma niezerową magnetyzację zgodną z warunkami brzegowymi. Po uściśleniu rozumowanie to stanowi treść *argumentu Peierlsa*, z którym zaznajomimy się niedługo.

3.8 Zadania

1. (1 p) Wyprowadzić wzór na podatność magnetyczną w jednowymiarowym modelu Isinga. (tzn. przytoczyć wzór i zróżniczkować m po b – dopuszczalne jest różniczkowanie symboliczne). Zrobić wykres podatności jako funkcji od T dla $B = 0$. Zbadać, jak podatność zachowuje się w temperaturze bliskiej $T = 0$.
2. (1p) To samo dla ciepła właściwego w $d = 1$ modelu Isinga – również dla $B = 0$.
3. (0.5p) Znaleźć macierz przejścia dla modelu Isinga o spinie 1, tzn. zadanego hamiltonianem (2), ale gdzie spin może przyjmować wartości $0, \pm 1$. cd. dla osób zainteresowanych wynikami również numerycznymi; za cd. 2p. Znaleźć numerycznie największą wartość własną. Wykorzystując to, zrobić numeryczny wykres $c(T)$ i $\chi(T)$ (dla $B = 0$) oraz $m(B)$ dla trzech wybranych temperatur.
4. (0.5p. + 2 p.) To samo dla modelu Isinga o spinie $\frac{1}{2}$ i oddziaływaniu n.n. oraz n.n.n. (o równej amplitudzie).
5. (0.5p. + 2 p.) To samo dla drabinki Isinga.
6. (3p) To samo dla paska Isinga o szerokości 4, z periodycznymi warunkami brzegowymi.

7. (4p) To samo dla paska Isinga o szerokości 4, na sieci trójkątnej, z oddziaływaniem *antyferromagnetycznym*. Porównać wykresy ciepła właściwych i podatności modelu Isinga na sieciach: kwadratowej i trójkątnej.

Uwaga. Zadania te, brane łącznie, wykraczają znacznie poza zakres wykładu. Jako zadania quasi-obowiązkowe proponuję jedno z zadań 1 lub 2, oraz napisanie dwóch macierzy przejścia z zadań 3-5.

4 Teoria pola średniego

4.1 Sformułowanie modelu

W tym rozdziale zajmniemy się *modelem pola średniego*. Przestrzeń konfiguracyjna układu jest analogiczna, jak dla modelu Isinga, tzn. mamy N spinów $\frac{1}{2}$. Hamiltonian dany jest wzorem:

$$H_N = \frac{J}{N} \sum_{i,j} s_i s_j - B \sum_i s_i. \quad (16)$$

W pierwszym wyrazie, sumowanie odbywa się po *wszystkich* parach, z jednakowym czynnikiem; znaczy to, że mamy do czynienia z oddziaływaniem dalekozasięgowym w układzie. Ponadto, patrząc na Hama (16) widzimy obecność dziwnego czynnika $\frac{J}{N}$ przed sumą. Czynnikiem $\frac{J}{N}$ gra rolę stałej sprzężenia, która w tym przypadku *zależy od rozmiaru układu* – a spodziewalibyśmy się, że stała oddziaływania *nie powinna zależeć* od ilości spinów! Gdyby jednak nie było czynnika $\frac{1}{N}$, to wtedy *energia układu nie byłaby proporcjonalna do liczby węzłów* (rosłaby jak kwadrat liczby węzłów). Wybieramy tu (trochę subiektywnie) 'mniejsze zło': Ocalamy intensywność (proporcjonalność energii układu od liczby węzłów) kosztem tego, że stała sprzężenia zależy od liczby węzłów.

Zakładamy, że mamy do czynienia z układem *ferromagnetycznym*, tzn. $J < 0$.

4.2 Liczenie sumy statystycznej

Zauważmy, że ponieważ mamy do czynienia z sumą po *wszystkich* iloczynach $s_i s_j$, to ta suma jest *pełnym kwadratem* (plus stała). Mamy więc:

$$\begin{aligned} Z_n &= \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta H_N) = \sum_{\{s_i\}} \exp \left[-\frac{\beta J}{N} \sum_{i,j} s_i s_j + \beta B \sum_i s_i \right] \\ &= \sum_{\{s_i\}} \exp \left[-\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i s_i \right)^2 - \beta J + \beta B \sum_i s_i \right]. \end{aligned}$$

Oznaczmy teraz: $K = \beta J$; $b = \beta B$. Ponadto, wszystkie konfiguracje spinów podzielimy na grupy. W pierwszej wszystkie spiny są skierowane do góry. Sumaryczna magnetyzacja wynosi tu N . Ilość tych konfiguracji wynosi $\binom{N}{0}$. Do drugiej grupy należą konfiguracje, gdzie $N - 1$ spinów jest skierowana do góry, a jeden jest skierowany w dół. Sumaryczna magnetyzacja wynosi $N - 2$, zaś ilość konfiguracji $\binom{N}{1}$. Itd.; do $(k + 1)$ -wszej grupy należą konfiguracje, gdzie $N - k$ spinów jest skierowana do góry, a k jest skierowanych w dół. Sumaryczna magnetyzacja wynosi $N - 2k$, zaś ilość konfiguracji $\binom{N}{k}$.

Zapiszmy teraz sumę statystyczną jako:

$$\begin{aligned} e^{\beta J} Z_N &= \exp \left(-\frac{K}{2} N + bN \right) \binom{N}{0} + \exp \left(-\frac{K}{2} \frac{(N-2)^2}{N} + b(N-2) \right) \binom{N}{1} \\ &+ \dots + \exp \left(-\frac{K}{2} \frac{(N-2k)^2}{N} + b(N-2k) \right) \binom{N}{k} + \dots \end{aligned}$$

$$= \sum_{k=0}^N \exp \left(-\frac{K}{2} \frac{(N-2k)^2}{N} + b(N-2k) \right) \binom{N}{k}. \quad (17)$$

Przed liczeniem logarytmu zamienimy symbole Newtona na exponensy; a uczynimy to przy użyciu wzoru Stirlinga. Wzór Stirlinga, pozwalający na przybliżone obliczanie silni dużych liczb, ma postać:

$$n! = \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n e^{\theta/12n}, \quad \text{gdzie } 0 < \theta < 1; \quad (18)$$

(wyprowadzenie można znaleźć np. w II t. Fichtenholza, lub w I tomie Whittakera i Watsona). Stąd:

$$\ln n! = n \ln n - n + \frac{1}{2} \ln(2\pi n) + \frac{\theta}{12n}; \quad (19)$$

stąd mamy dla logarytmu symbolu Newtona, przy zachowaniu tylko wyrazów, co nie znikną w granicy $N \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \ln \binom{N}{k} &= \ln N! - \ln(N-k)! - \ln k! = N \ln N - N - (N-k) \ln(N-k) + N-k - k \ln k + k \\ &= N \ln N - (N-k) \ln(N-k) - k \ln k \\ &= N \left[\ln N - \ln(N-k) + \frac{k}{N} \ln(N-k) - \frac{k}{N} \ln k \right] \\ &= N \left[-\ln \frac{N-k}{N} + \frac{k}{N} \ln \frac{N-k}{N} - \frac{k}{N} \ln \frac{k}{N} \right] \\ &= N \left[-\ln \left(1 - \frac{k}{N}\right) + \frac{k}{N} \ln \left(1 - \frac{k}{N}\right) - \frac{k}{N} \ln \frac{k}{N} \right] \\ &= N [-\ln(1 - \alpha_k) + \alpha_k \ln(1 - \alpha_k) - \alpha_k \ln \alpha_k] \end{aligned}$$

gdzie oznaczyliśmy:

$$\alpha_k \equiv \frac{k}{N}. \quad (20)$$

Wstawiając teraz powyższą postać ln'ów współczynników Newtona do wzoru na sumę statystyczną (17), otrzymujemy

$$\begin{aligned} &e^{\beta J} Z_N \\ &= \sum_{k=0}^N \exp \left\{ N \left[-\frac{K}{2} (1 - 2\alpha_k)^2 + b(1 - 2\alpha_k) - \ln(1 - \alpha_k) + \alpha_k \ln(1 - \alpha_k) - \alpha_k \ln \alpha_k \right] \right\} \\ &\equiv \sum_{k=0}^N \exp(N - \mathcal{F}(\alpha_k)) = \sum_{k=0}^N \epsilon_k^N \end{aligned} \quad (21)$$

gdzie oznaczyliśmy:

$$-\mathcal{F}(\alpha) = -\frac{K}{2} (1 - 2\alpha)^2 + b(1 - 2\alpha) - \ln(1 - \alpha) + \alpha \ln(1 - \alpha) - \alpha \ln \alpha. \quad (22)$$

oraz

$$\epsilon_k = \exp(-\mathcal{F}(\alpha_k)).$$

Oszacujmy teraz sumę statystyczną (po podzieleniu przez stałą $e^{\beta J}$). Mamy:

$$\max_k \epsilon_k^N \leq Z_N = \sum_{k=0}^N \epsilon_k^N \leq (N+1) \max_k \epsilon_k^N$$

Zapiszmy teraz energię swobodną. Korzystając z:

$$-\beta f_N = \frac{1}{N} \ln Z_N$$

i monotoniczności logarytmu, mamy:

$$\max_k \ln \epsilon_k \leq -\beta f_N \leq -\frac{\ln(N+1)}{N} + \max_k \ln \epsilon_k \quad (23)$$

Weźmiemy zaraz granicę $N \rightarrow \infty$. Ale zanim to zrobimy, to przypomnijmy sobie relację (20) pomiędzy k oraz α_k , i uciąglijmy zmienną α_k , która na razie przyjmowała wartości *dyskretne* z przedziału $[0, 1]$, do zmiennej α , która przyjmuje wartości *ciągłe* z przedziału $[0, 1]$. W ten sposób możemy przejść od minimalizacji po k do minimalizacji po α , i przechodząc do granicy $N \rightarrow \infty$ we wzorze (23), dostajemy

$$-\beta f = \max_{\alpha \in [0,1]} \ln \exp(-\mathcal{F}(\alpha)) = \max_{\alpha \in [0,1]} (-\mathcal{F}(\alpha)),$$

lub

$$\beta f = \min_{\alpha \in [0,1]} (\mathcal{F}(\alpha)). \quad (24)$$

(Pamiętajmy tu, że obie funkcje: f oraz \mathcal{F} zależą jeszcze od parametrów β oraz B , lub K oraz b).

4.3 Co się dzieje przy zmienianiu temperatury

Zanim przejdziemy do znajdowania minimów w równaniu (24), zamieńmy zmienną α na μ , określoną jako

$$\mu = 1 - 2\alpha \quad \text{skąd} \quad \alpha = \frac{1 - \mu}{2}; \quad \alpha \in [0, 1] \quad \text{odpowiada} \quad \mu \in [-1, 1]. \quad (25)$$

Patrząc na definicję α_k widzimy, że jej analogon μ_k jest *magnetyzacją* konfiguracji spinów. Przepisując funkcję $\mathcal{F}(\alpha)$ w zmiennej μ mamy

$$\mathcal{F}(\mu) = \frac{K}{2} \mu^2 - b\mu + \ln \frac{1 + \mu}{2} - \frac{1 - \mu}{2} \ln \frac{1 + \mu}{1 - \mu}. \quad (26)$$

Zbadajmy teraz punkty krytyczne w równaniu (24). Warunek $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \alpha} = 0$ jest równoważny $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu} = 0$. Mamy:

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\mu)}{\partial \mu} = K\mu - b + \frac{1}{2} \ln \frac{1 + \mu}{1 - \mu} \quad (27)$$

Przyjrzyjmy się istnieniu rozwiązań równania (27). Jeżeli pochodną (27) do zera, otrzymujemy

$$\frac{1}{2} \ln \frac{1 + \mu}{1 - \mu} = K\mu - b,$$

lub, w nieco wygodniejszej postaci

$$\mu = \tanh(b - K\mu) \quad (28)$$

Weźmy najspierw sytuację $b = 0$, aby zobaczyć, czy (i jak) może się pojawiać spontaniczna magnetyzacja. Kładąc $b = 0$ w (28), dostajemy

$$\mu = \tanh(-K\mu) \quad (29)$$

Jest to równanie przestępne zwane też czasem TRANSCENDENTNYM (nie mylić z *transcendentalnym*¹) na μ .

Przy szukaniu rozwiązań równania (29) warto spojrzeć graficznie na sytuację. Istnienie rozwiązania odpowiada przecięciu wykresów funkcji $y = \mu$ oraz $y = \tanh(-K\mu)$. Widać, że równanie (29) *zawsze* posiada rozwiązanie $\mu_0 = 0$. Ale nie zawsze jest to rozwiązanie *jedyne*.

- a) Weźmy przypadek T duże, czyli $-K$ małe; otrzymujemy wówczas sytuację z **Rys. A** i rozwiązanie $\mu_0 = 0$ jest jedyne.
- c) Gdy T jest małe, a $-K$ duże, to mamy sytuację z **Rys. C** i istnieją *trzy* rozwiązania: oprócz $\mu_0 = 0$, jeszcze dwa niezerowe.
- b) Mamy jeszcze sytuację pośrednią, gdy K jest takie, że oba wykresy $y = \mu$ oraz $y = \tanh(-K\mu)$ są *styczne*. Mamy wówczas jedno rozwiązanie $\mu_0 = 0$. **Rys. B**

Czy wszystkie te rozwiązania są akceptowalne? Pamiętajmy bowiem, że szukamy *minimum* funkcji $\mathcal{F}(\mu)$, tzn. druga pochodna w punkcie krytycznym musi być *nieujemna*. Druga pochodna $\mathcal{F}(\mu)$ jest:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}(\mu)}{\partial \mu^2} = K + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1+\mu} + \frac{1}{1-\mu} \right] \quad (30)$$

Dla rozwiązania zerowego, mamy

$$\left. \frac{\partial^2 \mathcal{F}(\mu)}{\partial \mu^2} \right|_{\mu=0} = K + 1 \quad (31)$$

i widać, że dla $K > -1$ czyli $-K < 1$, pochodna będzie *dodatnia*. (odpowiada temu zakres temperatur: $\frac{-J}{k_B T} < 1$, czyli $T > \frac{-J}{k_B}$; pamiętajmy, że $J < 0$).

Dla $K = -1 \equiv K_c$ co odpowiada temperaturze równej

$$T_c = \frac{-J}{k_B} \quad (32)$$

(temperaturę tę zwiemy *temperaturą krytyczną*) druga pochodna \mathcal{F} w zerze się *zeruje*, zaś dla $T < T_c$, druga pochodna \mathcal{F} w zerze staje się *ujemna*, co powoduje, że rozwiązanie $\mu = 0$ jest *nieakceptowalne* tzn. *niefizyczne*. Fizyczne za to są niezerowe rozwiązania równania (29): tam druga pochodna \mathcal{F} jest większa od zera.

Zobaczymy jeszcze, co się dzieje w temperaturze krytycznej. Z definicji T_c , druga pochodna po μ jest tam równa zeru:

$$\left. \frac{\partial^2 \mathcal{F}(\mu)}{\partial \mu^2} \right|_{\mu=0} = K_c + 1 = 0; \quad (33)$$

trzecia pochodna:

$$\left. \frac{\partial^3 \mathcal{F}(\mu)}{\partial \mu^3} \right|_{\mu=0} = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{(1+\mu)^2} - \frac{1}{(1-\mu)^2} \right] \Big|_{\mu=0} = 0 \quad (34)$$

¹compare 'Moskwa-Pietuszki' W. Jerofiejewa, gdzie w ok. połowie trasy, współtowarzysze podróży i pijatyki, po wypiciu kolejnej kolejki mówili: – Trans-cen-den-talnie!

(nic dziwnego, ze względu na symetrię), oraz czwarta pochodna

$$\left. \frac{\partial^2 \mathcal{F}(\mu)}{\partial \mu^2} \right|_{\mu=0} = \left[\frac{1}{(1+\mu)^3} + \frac{1}{(1-\mu)^3} \right] \Big|_{\mu=0} = 2 > 0, \quad (35)$$

co odpowiada *minimum*, więc znowu jest to rozwiązanie *fizyczne*.

Uwaga – dygresja. Koncepcja pola średniego i wywodzące się stąd równanie (29) liczą sobie ok. 100 lat i były wielokrotnie przedstawiane w różnych wersjach. Przy okazji jednak, często się krytykuje MFT bardziej, niż ona na to zasługuje.

Jeden ze sposobów dojścia do równania (29) jest następujący. **UZUP.**

Wersja przedstawiona w tym wykładzie jest oparta na podejściu zaprezentowanym u K. Huanga, *Mechanika statystyczna* (starsze wydania), gdzie w analogiczny sposób analizowano kondensację Bosego-Einsteina.

Koniec uwagi – dygresji.

4.4 Funkcje termodynamiczne i wykładniki krytyczne

Aby obliczyć funkcje termodynamiczne, należy rozwiązać równanie (28) (dla dowolnego B) lub (29) (dla pola magn. równego zero). Rozwiązanie ma postać $\mu_0 = \mu_0(\beta, b)$ (B dowolne) lub $\mu_0 = \mu_0(\beta)$ ($B = 0$).

4.4.1 Energia swobodna

Podsumujmy więc, dla energii swobodnej:

$$\beta f = \mathcal{F}(\mu_0) = \frac{K}{2} \mu_0^2 - b \mu_0 + \ln \frac{1 + \mu_0}{2} - \frac{1 - \mu_0}{2} \ln \frac{1 + \mu_0}{1 - \mu_0}, \quad (36)$$

gdzie μ_0 jest rozwiązaniem równania

$$\mu_0 = \tanh(b - K \mu_0) \quad (37)$$

wynikające z warunku $\left. \frac{\partial \mathcal{F}(\mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu_0} = 0$.

Weźmy tu (do odwołania) $B = 0$. Okazuje się, że można prosto wyrazić *energię wewnętrzną* przez μ_0 :

4.4.2 Magnetyzacja spontaniczna i wykładnik β

Dla uzyskania magnetyzacji czy magnetyzacji spontanicznej jako funkcji temperatury nie obejdzie się bez rozwiązywania równania (37). Nie umiemy tego wypisać *explicite*, ale rozwiązanie istnieje w postaci uwikłanej.

Zbadajmy natomiast zależność $m(B)$ w pobliżu punktu krytycznego, co da nam wykładnik magnetyczny β (wykładowca ma nadzieję, że nie zajdzie konfuzja z $\beta = \frac{1}{k_B T}$). **UZUP.**

4.4.3 Energia wewnętrzna

Jak pamiętamy z cz. 2, energię wewnętrzną można policzyć z

$$u = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta}.$$

Mamy tu dwa zakresy temperatur:

- $T \geq T_c$: Tu $\mu_0 = 0$, co daje: $\beta f = \text{const}$, a więc $u = 0$.
- $T < T_c$. Najspierw przepiszmy równania (36) i (37) tak, aby jawnie zaznaczyć zależność od temperatury: $(\beta f)(\beta) = \mathcal{F}(\mu_0(\beta); \beta)$. Teraz liczymy:

$$u = \frac{\partial(\beta f)}{\partial\beta} = \frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\beta} + \underbrace{\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\mu}}_{=0} \frac{\partial\mu_0}{\partial\beta} = \frac{\partial}{\partial\beta} \left(\frac{K}{2} \mu_0^2 \right) = \frac{\partial}{\partial\beta} \left(\frac{\beta J}{2} \mu_0^2 \right) = \frac{J}{2} \mu_0^2 = -\frac{k_b T_c}{2} \mu_0^2$$

(ostatnia równość wykorzystuje definicję temp. krytycznej (32)).

Widać, że energia wewnętrzna jest *ciągła* jako funkcja temperatury, natomiast jest *niegładka* **RYS.**: ciepło właściwe (czyli pochodna u po temperaturze) ma *skok*.

4.4.4 Magnetyzacja w temperaturze krytycznej i wykładnik δ

UZUP.

4.4.5 Podatność magnetyczna i wykładniki γ

UZUP.

4.5 Wykładniki krytyczne inaczej: Jaskółczy ogon czyli A_3

4.6 Do czego przydaje się MFT

MFT przydaje się jako pierwszy krok w analizie modeli, dla których brak rozwiązania ściślego oraz porządniejszych metod analizy; oczywiście do wyników MFT należy podchodzić z rezerwą.

Najpoważniejsze wady MFT (z punktu widzenia związku z rzeczywistymi układami) to: -) zależność stałej sprzężenia od rozmiaru układu; -) zerowe ciepło właściwe dla $T > T_c$.

Istnieją jednak układy, z oddziaływaniami o dużym zasięgu, *dobrze* opisywane przez MFT!

Pokaz rysunków z Ott et al.

(Bardzo rzadka sytuacja, ale jednak).

Ale jest kilka przypadków, gdzie wyniki MFT są *ściśle*:

- Wykładniki krytyczne w dostatecznie dużych wymiarach osiągają wartości *średnio-polowe*.
- Temperatura krytyczna otrzymana z MFT służy jako *górną granicę* temperatur krytycznych w układach rzeczywistych.

4.7 Zadania

1. (0.5 p.) Pokazać, że dla $T < T_c$, niezerowe rozwiązania μ_0 równania (29) są dopuszczalne, tzn. że $\left. \frac{\partial^2 \mathcal{F}(\mu)}{\partial \mu^2} \right|_{\mu_0} > 0$
2. (1.5 p.) Rozwiązać model \mathbb{Z}_3 pola średniego, tzn. gdzie spiny oddziałują 'każdy z każdym' wg reguły $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, gdzie \mathbf{S}_i przyjmuje wartości: $(0, 1), (\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}), (-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$.

3. (3 p.) Rozwiązać model pola średniego dla spinu 1 a la Blume-Capel. Zbadać punkt trójkrytyczny i znaleźć tam wykładniki krytyczne.

Uwaga. Zadanie 3 na razie w wersji szkicowej, będzie doprecyzowane.

5 Argument Peierlsa i spontaniczna magnetyzacja w $d = 2$ modelu Isinga w niskich temperaturach

5.1 Sformułowanie konturowe (wielobokowe) sumy statystycznej

Zacznijmy od geometrycznego przedstawienia sumy statystycznej modelu Isinga przez tzw. *wieloboki*.

Założmy, że mamy model Isinga z hamiltonianem

$$H_{\Lambda} = J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

na sieci kwadratowej. Zakładamy, że $J < 0$ (przypadek ferromagnetyczny).

Weźmy (w tej Subsection) układ o geometrii kwadratu $N \times N$ z periodycznymi warunkami brzegowymi (później będą inne). Są dwa stany podstawowe (wszystkie spiny '+' lub '-'), oba o energii $E_{g.s.} = 2N^2 J$ (mamy $2N^2$ par najbliższych sąsiadów (n.n. – nearest neighbours), każda para wnosi energię J).

Każdy stan układu to pewna konfiguracja plusów i minusów na sieci. Zauważmy, że energia takiej konfiguracji (dokładniej, energii konfiguracji minus energia stanu podstawowego) to ilość par n.n. gdzie sąsiedzi mają *różne* spiny. Możemy to zobrazować w ten sposób, że jeśli w danej parze spinów $\langle ij \rangle$ spiny są *różne*, to w poprzek wiązania $\langle ij \rangle$ rysujemy kreskę (na *sieci dualnej*). Jeśli spiny są zgodne, to kreski nie rysujemy. W ten sposób, konfigurację zakodowaliśmy jako *wielobok* na sieci dualnej. **RYS. Pei1**

Własności wieloboków:

1. Wieloboki są *zamknięte*.
2. Z każdego węzła sieci dualnej wychodzi 0, 2 lub 4 boki wieloboku.
3. Energia konfiguracji (ponad stan podstawowy) jest proporcjonalna do długości wieloboku, dokładniej, jeśli wielobok ma długość l , to energia takiej konfiguracji wynosi

$$E = 2Jl$$

4. Ilość boków wieloboku jest *parzysta*. (Zakładamy, że N jest parzyste) Najmniejszy wielobok ma 4 boki; największy – to wszystkie wiązania na sieci dualnej, w ilości $2N^2$.
5. Relacja między konfiguracjami a wielobokami jest '2 – 1': Dany wielobok odpowiada *dwóm* konfiguracjom (różniących się znakiem każdego spinu). (Dalej ten obrazek trochę zmodyfikujemy, aby relacja: konfiguracje vs. wieloboki była '1 – 1').
6. W sumie statystycznej występują *wszystkie możliwe* wieloboki na sieci.

Wypiszmy teraz sumę statystyczną:

$$\begin{aligned} Z_{N \times N} &= 2e^{-2\beta N^2 J} \left[1 + N^2 e^{8\beta J} + 2N^2 e^{12\beta J} + \dots + e^{4\beta J N^2} \right] \\ &= 2x^{-N^2} \left[1 + N^2 x^4 + 2N^2 x^6 + \left(\frac{1}{2}N^4 + \frac{9}{2}N^2 \right) x^8 + (2N^4 + 12N^2) x^{10} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{6}N^6 + \frac{13}{2}N^4 + \frac{112}{3}N^2 \right) x^{12} + \dots \right] \end{aligned} \quad (38)$$

gdzie $x = e^{2\beta J}$. (Ilustracja: **RYS. Pei2**) (W powyższym wzorze niejawnie założyliśmy, że $N > 6$; w przeciwnym przypadku współczynniki są trochę inne – trzeba wzór zmodyfikować o człony brzegowe). Możemy więc skrótowo zapisać

$$Z_{N \times N} = 2x^{-N^2} \sum_k A_k x^k, \quad \text{gdzie } k = 0, 4, 6, \dots, 2N^2 - 6, 2N^2 - 4, 2N^2 \quad (39)$$

Współczynniki A_k można wyliczyć ściśle (choć nie jest to proste), ale w tym rozdziale będziemy je *szacować*.

1. ? Dywagacje o tym, że w granicy TD do sumy stat. wchodzi tylko $\max_k A_k$?
2. ? stosowny obrazek, + komentarz jak to można zinterpretować w języku balansu entropii i energii?
3. ? Co się zmienia gdy wprowadzi się pole magnetyczne?
4. ? Uwaga że gdy się liczy $\frac{\ln Z_{N \times N}}{N^2}$, to wchodzi tylko *spójne* wieloboki?

5.2 Różne miary uporządkowania magnetycznego

Dla danej konfiguracji, magnetyzacja na jeden spin wynosi

$$M_N = \frac{N_+ - N_-}{N}$$

Dla układu o swobodnych lub periodycznych warunkach brzegowych, z symetrii mamy: $\langle M \rangle_N = 0$ dla *dowolnego* N i, w konsekwencji, w granicy termodynamicznej też $\langle M \rangle = 0$. Kryterium, że spontaniczna magnetyzacja pojawi się, jeżeli średnie namagnesowanie będzie różne od zera, przeocza więc dużą liczbę ciekawych sytuacji i dobrze byłoby znaleźć inne, bardziej czułe.

1. Zdefiniujemy wielkość, mogącą służyć jako określona miara spontanicznego namagnesowania:

$$M_0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle |M| \rangle_N; \quad (40)$$

nasuwają się tu od razu pytania o *istnienie* granicy, oraz, czy jest ona *niezależna* od warunków brzegowych. Pierwsze pytanie CHYBA ma odpowiedź pozytywną; drugie, CHYBA też.

2. Druga miara uporządkowania, to pytanie, czy jest różna od zera wielkość

$$M_{\square} = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\langle M^2 \rangle_N} \quad (41)$$

3. Najbardziej chyba fizyczna jest definicja, która się pojawiła na samym początku, a mianowicie rozpatrujemy układ w polu magnetycznym B , liczymy magnetyzację jako funkcję pola magnetycznego $M(B)$ i magnetyzację spontaniczną określamy jako

$$M = \lim_{B \rightarrow 0_+} M(B). \quad (42)$$

Niestety, definicja ta okazuje się być trudna w użyciu.

4. Wreszcie również fizyczne jest kryterium, polegające na określeniu, czy jest różna od zera granica

$$\lim_{|i| \rightarrow \infty} \langle s_0 s_i \rangle, \quad (43)$$

mówiąca, czy niezerowe jest prawdopodobieństwo, że dowolnie dalekie spiny będą ustawione w tym samym kierunku. (Jak zwykle jest pytanie o istnienie granicy, a jeśli istnieje, to o niezależność jej od kierunku).

Znane są wyniki, wiążące powyższe wielkości.

- I tak np. dla modelu Isinga okazuje się, że

$$M_0 \leq M_{\square} \tag{44}$$

Lieb, Schulz i Mattis '64.

Uwaga. Dla skończonych N , powyższa nierówność jest banalna. Banalne jest również skonstatowanie, że jeżeli granica TD istnieje, to powyższa nierówność jest też prawdziwa w granicy. To co jest niebanalne, to pokazanie, że obie granice istnieją. (Dziękuję słuchaczom, którzy przez podkreślenie banalności powyższej nierówności dla skończonego N sprowokowali wyjaśnienie, dlaczego nierówność LSM jest nietrywialna.)

- Ponadto:

$$M_{\square} \leq M,$$

Griffiths, '67.

- Griffiths pokazał (co będzie treścią dwu następnych Subsections), że $\langle |M| \rangle_N$ ma dolną granicę niezależną od N dla układu o swobodnych warunkach brzegowych:

$$\langle |M| \rangle_N \geq M_1 > 0 \quad (M_1 - \text{liczba}) \tag{45}$$

Zanim jednak to konkretnie policzymy, to rozpatrzmy, w ślad za Griffithsem,

5.3 Układ o geometrii kwadratu z ustalonymi spinami na brzegach

Tak więc, weźmy układ o geometrii kwadratu, zawierający N spinów. Tzn. mamy kwadrat $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$. Zakładamy, że wszystkie spiny na brzegach kwadratu mają ustalony znak (powiedzmy, "+"); jest ich $\sqrt{N} - 4$.

Tym razem zmodyfikujemy nieco pojęcie wieloboku tak, by było ono w '1-1' odpowiedności z konfiguracjami. Mianowicie nadajmy każdemu spójnemu kawałkowi wieloboku (będziemy go zwać **konturem**) kierunek, definiując go tak, że spiny '+' będą *na lewo* od konturu, a spiny '-' *na prawo*. **RYS. Pei3** Ponadto umówmy się, że nie ma wierzchołków, z których wychodzą 4 bond'y. Jeśli spotykają się w wierzchołku 4 bond'y, to uznajmy, że są to dwa kontury, które 'mijają się'. W ten sposób, jeżeli w jakimś wierzchołku spotykają się dwa kontury, to każdy z nich 'skręca w prawo', aby się uniknęły.

W ten sposób, wzbogacając kontur o orientację, ujednoznaczniamy związek między wielobokami (zbiorami konturów) a konfiguracjami.

Nazwijmy \mathcal{P} zbiór wszystkich konturów dla układu o spinach "+" na brzegu. Tylko takie kontury będą występować w sumie statystycznej i liczenia średnich.

Zauważmy, że dla wszystkich konfiguracji ze zbioru \mathcal{P} , kontury otaczające spiny "-" tworzą *wyspy* – tzn. kontury te są *zamknięte*. **RYS. Pei4**

Zauważmy również, że każdy spin "-" jest otoczony przynajmniej jednym konturem.

Kolejna obserwacja: *Kontur o długości b otacza co najwyżej $\frac{b^2}{16}$ spinów.* **RYS. Pei5**

Uwaga. Nierówność tę możemy rozpatrywać jako dyskretny analog *nierówności izoperymetrycznej* (jaki jest największy obszar, otoczony krzywą o długości b). Widać, że problem ma różne rozwiązania w przypadku dyskretnym i ciągłym.

Więc: Dla dowolnej konfiguracji $C \in \mathcal{P}$, ilość spinów N_- w C jest *nie większa* niż:

$$N_- \leq \sum_{b=4,6,8,\dots} \frac{b^2}{16} \sum_{i=1}^{m(b)} X_b^{(i)}, \quad (46)$$

gdzie $m(b)$ jest liczbą możliwych *spójnych* wieloboków o długości b , zaś $X_b^{(i)}$ jest określone jako:

$$X_b^{(i)} = \begin{cases} 1 & \text{gdy } i\text{-ty kontur występuje w konfiguracji } C \\ 0 & \text{w pozostałym przypadku.} \end{cases}$$

Wielkości $m(b)$ oraz $X_b^{(i)}$ trudno jest obliczyć, ale dość łatwo oszacować.

- Na $m(b)$ mamy oszacowanie:

$$m(b) \leq 4N3^{b-1} \frac{1}{b}. \quad (47)$$

Bo: Budujmy cały kontur odcinkami. Zaczniemy od jakiegoś węzła początkowego; mamy N możliwości jego wyboru.

Po wybraniu węzła startowego, w pierwszym kroku możemy iść w czterech kierunkach. Potem już co najwyżej w trzech, bo nie można wracać (dokładniej, k -ty krok nie może być $(k-1)$ -wszym w odwrotnym kierunku). **RYS. Pei6** Razem dla wieloboku zamkniętego i spójnego długości b daje to $N \cdot 4 \cdot 3^{b-1}$ możliwości; ale tak naprawdę jest ich mniej, bo konstrukcję wieloboku można zacząć z *dowolnego* jego wierzchołka, a wielobok długości b ma b wierzchołków; stąd czynnik $\frac{1}{b}$ we wzorze (47).

Teraz: Rozpatrzmy kontur $\gamma_b^{(l)}$ (o długości b oraz o numerze l wśród konturów o długości b). Prawdopodobieństwo znalezienia tego konturu $\text{Prob}(\gamma_b^{(l)})$ wśród wszystkich możliwych konfiguracji \mathcal{P} jest *wartością średnią wielkości* $X_b^{(l)}$, tj.

$$\text{Prob}(\gamma_b^{(l)}) = \langle X_b^{(l)} \rangle = \frac{\sum_C' e^{-\beta E_C}}{\sum_{C \in \mathcal{P}} e^{-\beta E_C}}, \quad (48)$$

gdzie w mianowniku mamy sumowanie po *wszystkich* konfiguracjach należących do \mathcal{P} , (w mianowniku jest więc suma statystyczn), natomiast w liczniku sumujemy *tylko* po konfiguracjach, zawierających kontur $\gamma_b^{(l)}$ (prim przy znaku sumy w liczniku został postawiony dla zaznaczenia tego faktu).

Niech teraz C będzie konfiguracją zawierającą kontur $\gamma_b^{(l)}$.

Niech C^* będzie konfiguracją otrzymaną z C przez *odwrócenie każdego spinu wewnątrz* $\gamma_b^{(l)}$. **RYS. Pei7**

Widać, że jeśli $C \in \mathcal{P}$, to również $C^* \in \mathcal{P}$.

Energie obu konfiguracji C, C^* są powiązane następująco:

$$E_C = E_{C^*} - 2Jb; \quad (49)$$

(przez usuwanie konturu energię *zmniejszamy*, więc C^* ma energię *mniejszą* o długość konturu $\gamma_b^{(l)}$; pamiętajmy, że $J < 0$).

Teraz!! Mianownik prawej strony wyrażenia (48) *zmaleje* (a więc r.h.s. *wzrośnie*), jeżeli w mianowniku weźmiemy nie wszystkie, a *tylko niektóre* konfiguracje; a mianowicie te,

które zostały otrzymane z konfiguracji w liczniku przez zastosowanie operacji odwrócenia spinów wewnątrz konturu $\gamma_b^{(l)}$.

Wtedy licznik i mianownik są *proporcjonalne*, ze stałą proporcjonalności (p. równ. (49) równą $e^{2\beta J}$. Mamy więc:

$$\langle X_b^{(l)} \rangle \leq e^{2\beta J} \quad (50)$$

co daje oszacowanie

$$\langle N_- \rangle \leq \sum_{b=4,6,8,\dots}^{2N^2} \frac{b^2}{16} \sum_{i=1}^{m(b)} \langle X_b^{(i)} \rangle \leq \frac{N}{12} \sum_{b=4,6,\dots}^{\infty} b 3^b e^{2b\beta J} = \frac{N}{12} \sum_{b=4,6,\dots}^{\infty} b (3e^{2\beta J})^b. \quad (51)$$

Oznaczmy:

$$\kappa = 3e^{2\beta J}. \quad (52)$$

Każdy ze Słuchaczy/Czytelników niechybnie zorientuje się od razu, że warunkiem zbieżności szeregu (51) jest

$$\kappa \equiv 3e^{2\beta J} < 1. \quad (53)$$

Widać, że szereg występujący w nierówności (51) będzie *zbieżny dla dostatecznie małej temperatury*, a konkretnie, przepisując warunek (53), dla

$$\beta < \frac{1}{2J} \ln \frac{1}{3}, \quad \text{tj.} \quad \beta > \frac{1}{2|J|} \ln 3. \quad (54)$$

Natomiast oszacowanie (46) będzie z sensem, gdy znajdziemy temperaturę, dla której $N_- < \frac{1}{2}$. Aby ją znaleźć, trzeba wysumować szereg występujący w (51).

$$\langle N_- \rangle \leq \frac{N}{12} \sum_{b=4,6,\dots} b \kappa^b = \frac{N}{12} (2\kappa^2 + 4\kappa^4 + 6\kappa^6 + \dots - 2\kappa^2) = \frac{N}{6} (x + 2x^2 + 3x^3 + \dots - x)$$

gdzie oznaczyliśmy $x = \kappa^2$. Powyższą sumę można łatwo wyrazić przez *szereg geometryczny*, mamy bowiem:

$$(1 + x + x^2 + \dots)' = 1 + 2x + 3x^2 + \dots = \frac{1}{x} (x + 2x^2 + 3x^3 + \dots) = \left(\frac{1}{1-x} \right)' = \frac{1}{(1-x)^2},$$

mamy więc

$$(x + 2x^2 + 3x^3 + \dots) - x = \frac{x}{(1-x)^2} - x = x \frac{1 - (1-x)^2}{(1-x)^2} = x^2 \frac{2-x}{(1-x)^2}$$

czyli

$$\langle N_1 \rangle \leq \frac{N}{6} \frac{\kappa^4 (2 - \kappa)^2}{(1 - \kappa^2)^2}.$$

Patrząc, kiedy $\frac{\langle N_- \rangle}{N}$ stanie się mniejsze od $\frac{1}{2}$ można policzyć, że stanie się to, gdy $\kappa \approx 0.77$. Oznaczmy tę wartość κ jako $\tilde{\kappa}_c$; mamy: $e^{2\tilde{\beta}_c J} \approx \frac{0.77}{3}$, czyli $|\tilde{\beta}_c J| \approx \frac{1}{2} \ln \frac{0.77}{3} \approx 0.68$.

Wartość dokładna temp. krytycznej jest: $\sinh 2|\beta_c J| = 1$, co daje $\beta_c J_c \approx 0.44069$, czyli

$$\frac{\tilde{T}_c}{T_c} = \frac{\beta_c J}{\tilde{\beta}_c J} \approx 0.6483.$$

Uwagi.

1. Dla układu o geometrii kwadratu z ustalonymi spinami na brzegach, uzyskaliśmy oszacowanie na *magnetyzację*.

2. Z rozwiązania ścisłego (lata 80. XX w., Abraham) wiadomo, że dla $T > T_c$, dla układu w geometrii kwadratu ze stałym polem brzegowym, magnetyzacja w granicy TD jest równa zero.
3. Wynik pokazuje, że poniżej T_c , 'infinitesimalna' zmiana warunków brzegowych popycha układ w kierunku konkretnego stanu podstawowego.

5.4 Układ ze swobodnymi spinami na brzegach

Tu będziemy się zajmować oszacowaniem na $\langle |M| \rangle$.

Patrząc na kontury, widzimy, że w odróżnieniu od poprzedniej sytuacji, kontury mogą *nie być* zamknięte. **RYS. F0**

Weźmy najsamprzód kontur *zamknięty*. Dzieli on zbiór wszystkich spinów na dwa rozłączne podzbiory: Do jednego należą spiny leżące *wewnątrz* konturu, a do drugiego *na zewnątrz*. **RYS. F1**

Jeśli zaś kontur jest *otwarty*, to również dzieli on zbiór spinów na dwa (rozłączne) podzbiory. Przyjmijmy konwencję, że mniejszy z tych zbiorów (mniejszy pod względem liczby elementów) nazwiemy znajdującym się *wewnątrz* konturu, zaś większy, że jest *na zewnątrz* konturu. Jeśli zaś oba podzbiory mają tę samą liczbę elementów, to podzbiór, znajdujący się po prawej stronie konturu, nazwijmy będącym *we wnętrzu* konturu (więc podzbiór z lewej strony konturu znajduje się na zewnątrz). **RYS. F2 a, b.**

W każdym przypadku, we wnętrzu konturu długości b leży co najwyżej $\frac{1}{2}b^2$ spinów.

Można tu oszacować prawdopodobieństwo występowania i -tego konturu o długości b wśród wszystkich dopuszczalnych tu konfiguracji (tu zbiór \mathcal{P} wszystkich konfiguracji jest bez ograniczeń: Każdy spin może przyjmować wartości ± 1). Rozumowanie jest tu analogiczne jak w przypadku poprzednim; wszystkie kroki prowadzące od (48) do (50) można powtórzyć i otrzyma się, że wzór (50) obowiązuje również w tym przypadku.

Teraz: Podzielmy zbiór wszystkich konfiguracji na dwa podzbiory \mathcal{A} i \mathcal{B} : $\mathcal{A} \cup \mathcal{B} = \mathcal{P}$:

- Podzbiór \mathcal{A} : Należą do niego wszystkie konfiguracje takie, że wszystkie spiny 'minus' są otoczone przynajmniej przez jeden kontur;
- Podzbiór \mathcal{B} : Należą do niego wszystkie konfiguracje takie, że przynajmniej jeden spin 'minus' leży na zewnątrz wszystkich konturów.

Z konstrukcji widać, że są to zbiory nieprzecinające się.

Weźmy teraz jakąś konfigurację $C \in \mathcal{B}$. Każdy spin '+' w tej konfiguracji musi leżeć po przeciwnej stronie pewnego konturu pochodzącego od spinu '-' leżącego na zewnątrz wszystkich konturów. Wobec tego, każdy spin '+' leży wewnątrz przynajmniej jednego konturu.

Niech P_C będzie prawdopodobieństwem wystąpienia konfiguracji C . Odpowiednio, niech M_C , $(N_+)_C$, $(N_-)_C$ będą wartościami: magnetyzacji, liczby spinów '+', liczby spinów '-' odpowiednio w konfiguracji C Mamy:

$$\begin{aligned}
 \langle |M| \rangle &= \sum_{C \in \mathcal{P}} |M_C| P_C \geq \sum_{C \in \mathcal{A}} |M_C| P_C - \sum_{C \in \mathcal{B}} |M_C| P_C \\
 &= \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \left(\sum_{C \in \mathcal{A}} (N_-)_C P_C + \sum_{C \in \mathcal{B}} (N_+)_C P_C \right)
 \end{aligned} \tag{55}$$

Dla konfiguracji należących do zbioru \mathcal{A} , wszystkie spiny '–' leżą wewnątrz pewnego konturu. Mamy więc analog nierówności (46), w której jedynie należy zastąpić $\frac{b^2}{16}$ przez $\frac{b^2}{2}$, czyli mamy:

$$N_- \leq \sum_{b=4,6,8,\dots} \frac{b^2}{2} \sum_{i=1}^{m(b)} X_b^{(i)}, \quad (56)$$

Identyczna nierówność zachodzi dla ilości spinów N_+ w konfiguracjach ze zbioru \mathcal{B} . Ostatecznie mamy, pamiętając, że zbiory \mathcal{A} i \mathcal{B} są rozłączne:

$$\left(\sum_{C \in \mathcal{A}} (N_-)_C P_C + \sum_{C \in \mathcal{B}} (N_+)_C P_C \right) \leq \sum_{b=4,6,8,\dots} \frac{b^2}{2} \sum_{i=1}^{m(b)} \langle X_b^{(i)} \rangle \leq \text{umpapa} \quad (57)$$

gdzie κ dane jest – jak uprzednio – przez (52).

Pokazaliśmy więc, że dla dostatecznie niskich temperatur, ma miejsce oszacowanie (45) podane przez Griffithsa.

5.5 Co w wysokich temperaturach?

To co pokazaliśmy, to że w niskich temperaturach będzie istniało spontaniczne namagnesowanie. Dla dokończenia dowodu, że w układzie będzie przejście fazowe, trzeba by jeszcze zobaczyć, że w wysokich temperaturach *nie ma* spontanicznego namagnesowania. Robi się to przez zbadanie dwupunktowej funkcji korelacji i pokazanie, że funkcja ta maleje wykładniczo w wysokich temperaturach.

5.6 Uogólnienia

1. Łatwo zobaczyć, że analogiczne rozumowanie da się też przeprowadzić w wymiarze $d = 3$ (i wyższych); jedynie zamiast *konturów* trzeba rozpatrywać ich analogony, tzn. *wielościanny*.
2. Istotnym założeniem w argumentacji Peierlsa/Griffithsa było założenie o *symetrii* hamiltonianu względem odwrócenia spinów. Pojawia się naturalne pytanie, czy argumentację można zmodyfikować, tak by działała i w tym przypadku?

Okazuje się, że *tak*, choć rozważania są tu dużo bardziej skomplikowane. Stanowią one treść tzw. *teorii Pirogova-Sinai'a* (połowa lat 70. XX w.) Główne założenia i wyniki można tak przedstawić:

- (a) Układ ma skończoną ilość stanów podstawowych;
- (b) Sumę statystyczną daje się wyrazić przez 'kontury' (w $d = 2$, obiekty 'quasi-jednowymiarowe')
- (c) Energia konturu jest proporcjonalna do jego długości. (tzw. 'warunek Peierlsa')

Wtedy diagram fazowy stanów podstawowych, w temperaturze dostatecznie małej, ulega jedynie niewielkiej deformacji.

3. Jest sporo ciekawych modeli, gdzie ilość stanów podstawowych jest *nieskończona*. (Prototyp: Antyferromagnetyk Isinga na sieci trójkątnej). W niektórych sytuacjach udaje się pokazać, że w skończonych temperaturach będzie istniała *skończona* ilość faz. Na ogół b. złożone diagramy fazowe

4. *Kwantowa teoria Pirogova-Sinai'a*: Rozpatruje się układy typu: 'Układ klasyczny' plus 'mały dodatek kwantowy'. Prototyp: Silnie anizotropowy model Heisenberga. Wyniki:

Jeśli hamiltonian klasyczny spełnia założenia czynione przy klasycznej teorii $\Pi\rho\Sigma$, to jeśli dodatek kwantowy jest dostatecznie mały i temperatura jest dostatecznie niska, to (podobnie jak w klasycznej wersji $\Pi\rho\Sigma$) diagram fazowy stanów podstawowych, ulega jedynie niewielkiej deformacji.

- (a) Jeśli $H_{\text{klasyczny}}$ ma nieskończoną ilość stanów podstawowych, to mogą się dziać różne rzeczy...

6 412. rozwiązanie 2-d modelu Isinga: użycie całek grassmanowskich

6.1 Historia: Niektóre z metod otrzymania ścisłego rozwiązania modelu Isinga

- Onsager, 1944;
- Kaufman, 1949;
- Kac, Ward 1952;
- Vdovichenko 1963;
- Lieb, Schulz, Mattis 1964;
- Baxter, Enting 1978 (*399-th solution of the Ising model*);
- Samuel 1980: użycie zmiennych grassmanowskich (podstawa niniejszego przedstawienia).

Zmienne grassmanowskie – chleb powszedni w teorii pola; bardzo pożyteczne również w innych zastosowaniach (tu: mechanika statystyczna).

6.2 Zmienne antykomutujące i ich własności.

6.2.1 Zmienne grassmanowskie i funkcje od nich

Def. Algebra Grassmana nad \mathbb{C} . Niech będzie danych N obiektów η_α ($\alpha = 1, 2, \dots, N$) zwanych *zmiennymi grassmanowskimi*. Z tych zmiennych utworzymy *algebrę* (przez branie iloczynów zmiennych $\eta_i\eta_j$, $\eta_i\eta_j\eta_k$ itd; oraz branie kombinacji liniowych o współczynnikach z \mathbb{C} , z naturalnymi regułami liniowości, rozdzielności i łączności). Zakładamy!!! że $\{\eta_\alpha\}$ spełniają relacje

$$\eta_\alpha\eta_\beta + \eta_\beta\eta_\alpha = 0 \quad \forall \alpha, \beta. \quad (58)$$

W szczególności, $\eta_\alpha^2 = 0$.

Demistyfikacja zmiennych grassmanowskich, czyli jak identyczne struktury pojawiają się w różnych działach matematyki/fizyki.

1. Bardziej formalna definicja: Niech \mathcal{V} będzie przestrzenią wektorową nad \mathbb{C} , $\dim \mathcal{V} = N$. *Algebrą Grassmana* generowaną przez \mathcal{V} jest

$$\Lambda \mathcal{V} = \bigoplus_{k=0}^{\infty} \bigwedge^k \mathcal{V}, \quad (59)$$

gdzie $\bigwedge^0 \mathcal{V} = \mathbb{C}$, zaś $\bigwedge^k \mathcal{V}$ jest k -krotnym antysymetryzowanym iloczynem tensorowym \mathcal{V} . Więc !! Jeśli $\{\eta_1, \dots, \eta_N\}$ jest bazą w \mathcal{V} (związek z powyższą, mniej formalną definicją) to dowolny element $v \in \Lambda \mathcal{V}$ można przedstawić w postaci:

$$v = \sum_{k=0}^N \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq N} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_k} \eta_{i_1} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_k}$$

gdzie współczynniki $\alpha_{i_1 i_2 \dots i_k} \in \mathbb{C}$.

Uwaga. W geometrii różniczkowej elementy przestrzeni $\bigwedge^k \mathcal{V}$ nazywa się *k-formami*, i wektory bazy tejże przestrzeni oznaczają $\eta_{i_1} \wedge \eta_{i_2} \wedge \dots \wedge \eta_{i_k}$.

Dodawanie elementów $\Lambda\mathcal{V}$ odbywa się 'po składowych': Jeżeli:

$$v = \sum_{k=0}^N \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq N} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_k} \eta_{i_1} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_k}, \quad w = \sum_{k=0}^N \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq N} \beta_{i_1 i_2 \dots i_k} \eta_{i_1} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_k}$$

to, dla $\gamma, \delta \in \mathbb{C}$

$$\gamma v + \delta w = \sum_{k=0}^N \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq N} (\gamma \alpha_{i_1 i_2 \dots i_k} + \delta \beta_{i_1 i_2 \dots i_k}) \eta_{i_1} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_k};$$

zaś mnożenie – przez rozdzielność (mnożenia względem dodawania) i mnożenie elementów bazy zgodnie z:

$$(\eta_{i_1} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_k})(\eta_{j_1} \eta_{j_2} \dots \eta_{j_l}) = \begin{cases} 0, & \text{jeśli } \{i_1, i_2, \dots, i_k\} \cap \{j_1, j_2, \dots, j_l\} \neq \emptyset \\ \text{sgn}(m) \eta_{m_1} \eta_{m_2} \dots \eta_{m_{k+l}}, & \text{jeśli } \{i_1, i_2, \dots, i_k\} \cap \{j_1, j_2, \dots, j_l\} = \emptyset \end{cases}$$

gdzie $(m_1, m_2, \dots, m_{k+l})$ jest permutacją $(i_1, i_2, \dots, i_k, j_1, j_2, \dots, j_l)$, zaś $\text{sgn}(m)$ – znakiem permutacji.

Przykł. Niech $N = 3$. Weźmy:

$$(1 + 2a_1 a_3)(a_2 + 3a_2 a_3) = a_2 + 3a_2 a_3 + 2a_1 a_3 a_2 + 6a_1 a_3 a_2 a_3 = a_2 + 3a_2 a_3 - 2a_1 a_2 a_3$$

2. Operatory anihilacji N różnych cząstek tworzą algebrę Grassmana.
3. Zmienne grassmanowskie mogą też być reprezentowane przez *macierze*. Np. przedstawienie macierzowe algebry Grassmana dla $N = 2$ jest:

$$\eta_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \eta_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix};$$

Czytelnik/słuchacz zechce sprawdzić, że $\eta_1^2 = \eta_2^2 = \eta_1 \eta_2 + \eta_2 \eta_1 = 0$ i że nie jest to reprezentacja trywialna, tzn. $\eta_1 \eta_2 \neq 0$.

Własności te powodują, że najogólniejsza funkcja od zmiennych grassmanowskich jest wielomianem N -tego stopnia: Niech f będzie funkcją N zmiennych (rzeczywistych lub zespolonych), definiowaną przez szereg Taylora. Wtedy:

$$f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N) = a_0 + \sum_{\alpha} a_{\alpha} \eta_{\alpha} + \sum_{\alpha < \beta} a_{\alpha\beta} \eta_{\alpha} \eta_{\beta} + \dots + a_{123\dots N} \eta_1 \eta_2 \dots \eta_N, \quad (60)$$

gdzie współczynniki $a_I \in \mathbb{R}$ lub \mathbb{C} (I – wielowskaźnik).

6.2.2 Całki grassmanowskie

Def. Całkę po zmiennej grassmanowskiej definiuje się formalnie jako

$$\int d\eta = 0, \quad \int \eta d\eta = 1 \quad (61)$$

oraz dla N zmiennych:

$$\int \eta_1 \eta_2 \dots \eta_N d\eta_1 d\eta_2 \dots d\eta_N = 1; \quad (62)$$

Uwaga na kolejność zmiennych! Całka po czymkolwiek innym, jest zero.

Tak więc całka z funkcji N zmiennych, o postaci (60), jest

$$\int f d\eta \equiv \int f d\eta_1 d\eta_2 \dots d\eta_N = a_{123\dots N} \quad (63)$$

6.2.3 Własności całek grassmanowskich

1. *Przesunięcie zmiennej*: Niech $J \equiv \{J_\alpha\}$, $\alpha = 1, \dots, N$ – zmienne grassmanowskie:

$$J_\alpha J_\beta + J_\beta J_\alpha = 0, \quad \eta_\alpha J_\beta + J_\beta \eta_\alpha = 0 \quad \forall \alpha, \beta.$$

Wtedy

$$\int f(\{\eta_\alpha\}) d\eta = \int f(\{\eta_\alpha + J_\alpha\}) d\eta. \quad (64)$$

Bo: Gdy się rozwinie funkcję $f(\{\eta_\alpha + J_\alpha\})$, to jedynym członem, który będzie proporcjonalny o $\eta_1 \eta_2 \dots \eta_N$, będzie $a_{12\dots N}$ – ten sam wyraz co w rozwinięciu $f(\{\eta_\alpha\})$. I tylko całka po $d\eta_1 d\eta_2 \dots d\eta_N$ z tego wyrazu nie zniknie – bo całki z czegokolwiek innego poznikają.

2. *Zamiana zmiennych*: Niech:

$$\psi_\alpha = A_{\alpha\beta} \eta_\beta \quad (65)$$

gdzie A jest macierzą odwracalną. W ten sposób, $\{\psi_\alpha\}$ jest równoważnym zbiorem zmiennych antykomutujących.

Zachodzi:

$$\int f(\eta) d\eta = (\det A) \int f(A^{-1}\psi) d\psi. \quad (66)$$

lub też

$$d\eta = (\det A) d\psi \quad (67)$$

Uwaga. Zachowanie jest odmienne od tego czego należałoby się spodziewać dla zmiennych komutujących i całki Riemanna; tam mamy czynnik $(\det A)^{-1}$ zamiast $(\det A)$ w (67).

Aby zobaczyć, skąd się to bierze, rozpatrzmy najspierw przypadek $N = 1$. Niech η będzie zm. grassmanowską; mamy więc $\int \eta d\eta = 1$. Niech teraz $\psi = a\eta$ ($a \in \mathbb{C}$). ψ też jest zmienną grassmanowską, więc $\int \psi d\psi = 1$. Napiszmy: $d\eta = (\text{cós}) d\psi$ ($\text{cós} \in \mathbb{C}$) i mamy: $1 = \int \psi d\psi = \int a \frac{1}{(\text{cós})} \eta d\eta$, czyli $(\text{cós}) = a$; czyli otrzymujemy wersję $N = 1$ wzoru (67).

Przechodząc do przypadku ogólnego, sprawdzimy równość (67) na jedynym nieznikającym wyrazie bazowym, tzn. iloczynie wszystkich N zmiennych. Napiszmy znowu:

$$d\eta \equiv d\eta_1 d\eta_2 \dots d\eta_N = (\text{cós}) d\psi_1 d\psi_2 \dots d\psi_N \equiv (\text{cós}) d\psi.$$

Posłużymy się faktem znanym z teorii form (liniowych bądź różniczkowych). Pisząc zamianę zmiennych (65) (lub, dla skrótów, $\psi = A\eta$), i traktując ψ_1, \dots, ψ_N oraz η_1, \dots, η_N jako 1-formy różniczkowe (pod względem własności algebraicznych takie same jak zm. grassmanowskie) mamy:

$$\psi_1 \wedge \psi_2 \cdots \wedge \psi_N = (\det A) \eta_1 \wedge \eta_2 \cdots \wedge \eta_N$$

Tak więc:

$$1 = \int \eta d\eta = \frac{1}{\det A} \int \psi \cdot (\text{cós}) d\psi = \frac{(\text{cós})}{\det A} \int \psi d\psi = 1,$$

czyli $(\text{cós}) = \det A$, zatem $d\eta = (\det A) d\psi$, otrzymujemy więc (67).

Uwaga. Definiuje się również *różniczkowania* po zmiennych grassmanowskich; ale że nie będziemy tego używać, więc ciekawych (ciekawskich) odsyłam do prac Berezina lub Feldmana i in.

6.2.4 Działania kwadratowe

1. Dla dowolnej macierzy A wymiaru $N \times N$ zachodzi:

$$\int \exp \left(\sum_{\alpha\beta} \eta_\alpha A_{\alpha\beta} \eta_\beta^\dagger \right) d\eta d\eta^\dagger = \det A. \quad (68)$$

Tu $\eta_1, \dots, \eta_N, \eta_1^\dagger, \dots, \eta_N^\dagger$ są *niezależnymi* zmiennymi grassmanowskimi. Całkę po tych zmiennych (a raczej jej znak, przez ustalenie kolejności) definiuje się jako:

$$\int \eta_1 \eta_1^\dagger \eta_2 \eta_2^\dagger \dots \eta_N \eta_N^\dagger d\eta_1 d\eta_1^\dagger d\eta_2 d\eta_2^\dagger \dots d\eta_N d\eta_N^\dagger = 1.$$

Bo: Rozwinięcie exponensa kończy się na N -tym rzędzie. Całki po wyrazach niższego rzędu znikają; jedyny nieznikający wkład daje wyraz N -tego rzędu. Patrząc na kolejności poszczególnych wyrazów, oraz całkowity czynnik kombinatoryczny, widać, że wszystko się składa do wyznacznika.

Łatwiej: Skorzystać z wzoru na zamianę zmiennych (66) w całce, zamieniając wszelako *połowę* zmiennych: $\eta^\dagger \rightarrow A^{-1} \eta^\dagger$.

2. Dla dowolnej parzystowymiarowej macierzy A :

$$\int \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \eta_\alpha A_{\alpha\beta} \eta_\beta \right) d\eta = \text{Pf } A. \quad (69)$$

Uwagi:

- (a) Macierz A w (69) może być wybrana jako antysymetryczna.
- (b)

$$\text{Pf } A = \frac{1}{2^{N/2}} \frac{1}{(N/2)!} \sum_{\sigma \in S_N} (\text{sgn } \sigma) A_{\sigma(1)\sigma(2)} A_{\sigma(3)\sigma(4)} \dots A_{\sigma(N-1)\sigma(N)}$$

3. Są również analogi powyższych wyrażeń *bez* znaku permutacji (*permanent, hafffian*).

6.2.5 Przykład zastosowania zmiennych antykomutujących:

Stw. Dla antysymetrycznej macierzy A wymiaru parzystego zachodzi

$$(\text{Pf } A)^2 = \det A.$$

Dowód. W wyrażeniu (68) przeprowadźmy zamianę zmiennych:

$$\eta_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} (\eta_\alpha^{(1)} + i\eta_\alpha^{(2)}), \quad \eta_\alpha^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\eta_\alpha^{(1)} - i\eta_\alpha^{(2)});$$

Mamy:

$$d\eta_\alpha d\eta_\alpha^\dagger = id\eta_\alpha^{(1)} d\eta_\alpha^{(2)}$$

Ponieważ A – antysymetryczna, mamy:

$$\eta_\alpha A_{\alpha\beta} \eta_\beta^\dagger = \frac{1}{2} \left(\eta_\alpha^{(1)} A_{\alpha\beta} \eta_\beta^{(1)} + \eta_\alpha^{(2)} A_{\alpha\beta} \eta_\beta^{(2)} \right)$$

Wyrazy mieszane znikają na mocy antysymetrii A ; exponens faktoryzuje się na dwa exponensy (od zmiennych $\eta_\alpha^{(1)}, \eta_\alpha^{(2)}$), a całka faktoryzuje się na dwie całki, każda z których ma postać (69), tzn. daje Pfaffian.

6.3 Dwuwymiarowy model Isinga.

6.3.1 Sformułowanie wielobokowe: Wersja 'wysokotemperaturowa'

Było uprzednio pokazane, jak sumę statystyczną 2d modelu Isinga wyrazić przez wieloboki. Było to tzw. *rozwińnięcie niskotemperaturowe*: Zmienną, w której się rozwijało, była $x = e^{2\beta J}$; dla przypadku FM, $J < 0$, czyli x było tym mniejsze, im β większe, czyli im temperatura niższa; więc *dla niskich temperatur*, można (mieć nadzieję, że aby otrzymać dostatecznie dokładne informacje o zachowaniu układu, wystarczy) ograniczyć się tylko do kilku pierwszych wyrazów rozwinięcia – stąd nazwa. (Bardziej adekwatne uzasadnienie, to że szereg w zmiennej x dla energii swobodnej jest zbieżny tylko dla temperatur, mniejszych od temp. krytycznej).

Okazuje się, że można wyprowadzić jeszcze jedno wyrażenie na sumę statystyczną, gdzie *również* wchodzi wieloboki. Rozwinięcie tu wszelako odbywa się względem innej zmiennej, a mianowicie $t = \tanh(-\beta J)$ i, tym razem, małe t odpowiada małej β , czyli dużej temperaturze.

Punktem wyjścia jest znów wyrażenie na sumę statystyczną modelu Isinga. Niech tu Λ będzie kwadratem $M \times M$, oraz ilości najbliższych sąsiadów równej B ($B = 2M^2$, jeśli mamy okresowe warunki brzegowe, a trochę mniej, jeśli mamy otwarte warunki brzegowe). Wtedy

$$Z_{M \times M} = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j} = \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} \exp(-\beta J s_i s_j) \equiv \sum_{\{s_i\}} \prod_b e^{-\beta J \sigma_b} \quad (70)$$

gdzie przez b oznaczyliśmy parę najbliższych sąsiadów ('bond' lub: 'krawędź' na sieci: $b \equiv \langle ij \rangle$).

Niech teraz $K = -\beta J$. Zauważmy, że wielkość σ_b przybiera wartości jedynie 1 lub -1 , tak więc

$$e^{K\sigma_b} = \begin{cases} e^K & \text{dla } \sigma_b = 1 \\ e^{-K} & \text{dla } \sigma_b = -1 \end{cases}$$

co można zapisać jednym wzorem (pamiętając, że $\sigma_b \in \{+1, -1\}$):

$$e^{K\sigma_b} = \cosh K + \sigma_b \sinh K$$

Wykorzystując to, sumę statystyczną (70) zapiszemy jako:

$$\begin{aligned} Z_{M \times M} &= \sum_{\{s_i\}} \prod_b (\cosh K + \sigma_b \sinh K) \\ &= (\cosh K)^B \sum_{\{s_i\}} \prod_b (1 + \sigma_b \tanh K) \equiv (\cosh K)^B \sum_{\{s_i\}} \prod_b (1 + t \sigma_b) \end{aligned} \quad (71)$$

Rozwińmy teraz iloczyn pod znakiem sumy. Po rozwinięciu, otrzymamy pewien *wielomian* w t . Poszczególne wyrazy rozwinięcia możemy zilustrować graficznie wg następującej recepty:

Jeśli w rozwinięciu występują bond'y b_1, b_2, \dots, b_k , to na sieci rysujemy te bond'y; jeśli nie występują, to nie rysujemy.

W ten sposób, każdemu wyrazowi rozwinięcia przyporządkowaliśmy pewien zbiór bond'ów na zbiorze Λ ; występują tu *wszystkie możliwe* podzbiory zbioru bond'ów (jest ich więc na sztuki: 2^B).

Teraz musimy wysumować po konfiguracjach. Okaze się, że spośród tych wszystkich zbiorów bond'ów zostaną tylko niektóre.

Każdy wyraz rozwinięcia ma postać: $t^k \sigma_{b_1} \sigma_{b_2} \dots \sigma_{b_k}$. Pamiętając, że każda zmienna σ_b jest iloczynem wartości pewnych najbliższych sąsiadów: $\sigma_b = \sigma_i \sigma_j$, możemy ten wyraz przepisać w postaci $s_{i_1}^{\alpha_1} s_{i_2}^{\alpha_2} \dots s_{i_m}^{\alpha_m}$ (gdzie węzły i_1, i_2, \dots, i_m są węzłami występującymi w zbiorze bond'ów $\{b_1, b_2, \dots, b_k\}$). Potęgi $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ mogą przyjmować wartości: 1, 2, 3, 4, tak więc z wyrazu $s_{i_1}^{\alpha_1} s_{i_2}^{\alpha_2} \dots s_{i_m}^{\alpha_m}$ można wyrzucić czynniki będące parzystymi potęgami, a trzecie potęgi zastąpić pierwszymi, otrzymując w ten sposób $s_{j_1} s_{j_2} \dots s_{j_p}$.

Zauważmy teraz, że gdy wysumujemy $t^k s_{j_1} s_{j_2} \dots s_{j_p}$ po *wszystkich możliwych* konfiguracjach spinów na sieci, to otrzymamy *zero*. Niezerowy wkład do sumy wniosą tylko te wyrazy, gdzie *wszystkie* potęgi w iloczynie $s_{i_1}^{\alpha_1} s_{i_2}^{\alpha_2} \dots s_{i_m}^{\alpha_m}$ są *parzyste*. W interpretacji graficznej znaczy to, że niezerowy wkład do sumy dają tylko takie zestawy bond'ów, gdzie ilość bondów wychodzących z dowolnego wierzchołka jest *parzysta* (tzn. wynosi 0, 2 lub 4). Tak więc!! Otrzymaliśmy (w inny sposób niż uprzednio) obrazek *wielobokowy*:

$$Z_{M \times M} = (\cosh K)^B 2^{M^2} \sum_k P_k t^k, \quad (72)$$

gdzie P_k jest liczbą *wieloboków* możliwych do narysowania na sieci.

1. Uwagi o dualności i relacji rozwinięć: wysoko- i niskotemperaturowego
2. Uwagi o dualności sieci: trójkątnej i sześciokątnej i związku sum statystycznych tamże

6.3.2 Wyrażenie sumy statystycznej modelu Isinga z o.b.c. przez całkę grassmanowską

Zwiążmy z każdym węzłem $\mathbf{R} = (x, y)$ sieci Λ_M zbiór czterech zmiennych grassmanowskich

$$H_{\mathbf{R}}, \bar{H}_{\mathbf{R}}, V_{\mathbf{R}}, \bar{V}_{\mathbf{R}}$$

Miejmy z nimi następujące skojarzenie geometryczne **RYS. HiV**.

Zdefiniujmy następującą formę biliniową w tych zmiennych, nazywając ją *działaniem*:

$$\begin{aligned} S(t) = t \sum_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} \left(\bar{H}_{\mathbf{R}} H_{\mathbf{R} + \mathbf{e}_x} + \bar{V}_{\mathbf{R}} V_{\mathbf{R} + \mathbf{e}_y} \right) \\ + \sum_{\mathbf{R}} \left(\bar{H}_{\mathbf{R}} V_{\mathbf{R}} + \bar{V}_{\mathbf{R}} H_{\mathbf{R}} + \bar{V}_{\mathbf{R}} \bar{H}_{\mathbf{R}} + V_{\mathbf{R}} H_{\mathbf{R}} + H_{\mathbf{R}} \bar{H}_{\mathbf{R}} + V_{\mathbf{R}} \bar{V}_{\mathbf{R}} \right) \end{aligned} \quad (73)$$

Interpretacja graficzna wyrazów above: bond'y poziome lub pionowe *na sieci prostej* – wyrazy ze współczynnikiem t ; oraz części składowe wieloboków (kąty proste lub półpełne).

RYS.

Mamy następującą fundamentalną identyczność:

$$\frac{Z_{M \times M}}{(\cosh K)^{B 2^{M^2}}} = (-1)^{M^2} \int e^{S(t)} \prod_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} dV_{\mathbf{R}} dH_{\mathbf{R}} d\bar{V}_{\mathbf{R}} d\bar{H}_{\mathbf{R}} \quad (74)$$

Aby się przekonać o jej prawdziwości, rozwińmy *exponens* od działania, weźmy człony maksymalnego stopnia równego $4M$ (bo całka po niższych da zero) i porównajmy otrzymane wyrażenie ze sformułowaniem wielobokowym sumy statystycznej (72). Zauważmy rzeczy następujące.

1. Prawa strona jest wielomianem stopnia $4M$.

2. W wyrażeniu po r.h.s., na danej krawędzi może być co najwyżej jeden bok wieloboku (bo inne wyrazy zawierają kwadrat lub wyższe potęgi zm. grassmanowskiej, co jest równe 0).
3. Z każdego wierzchołka wychodzi *parzysta* ilość bond'ów (tzn. 0, 2 lub 4). Bo: Załóżmy, że z wierzchołka może wychodzić jeden bond. Odpowiada mu *pierwsza* potęga zm. grassmanowskiej (np. $V_{\mathbf{R}}$). Aby ją uzupełnić do maksymalnej (równej 4), muszą być obecne czynniki zawierające pozostałe zmienne (tu: $\bar{V}_{\mathbf{R}}, \bar{H}_{\mathbf{R}}, H_{\mathbf{R}}$). Nie da się tego zapewnić biorąc tylko wyrazy typu 'wierzchołkowego' (bez czynnika t), bo one są potęgi *parzystej*.
4. Więc: *każdy* wielobok ma poprawny współczynnik t^k , gdzie k – ilość boków.
5. *Każdy* wielobok jest reprezentowany przez pewien człon po prawej stronie (74).

Widać więc, że jest szansa aby obie strony równości (74) były równe. Lecz 'na tym rzecz nie skończona', bowiem trzeba stwierdzić, że: • Każdy wielobok jest reprezentowany *dokładnie* jeden raz, i • • Wszystkie wyrazy z prawej strony (74) są *dodatnie*.

Przy • jest tylko trochę gimnastyki, natomiast przy • • jest duuuuuużo.

Więc, *in extenso*, tego *nie będzie*.

Wykładowca poprzestanie na częściowych (więc, siłą rzeczy, tylko częściowo przekonywujących) ilustracjach.

6.3.3 S. stat. 2-d modelu Isinga z p.b.c. jako całka grassmanowska

6.3.4 S. stat. & energia swobodna 2-d modelu Isinga

Mając sumę statystyczną zapisaną w postaci całki grassmanowskiej (74), (a dokładniej w wersji dla okresowych warunków brzegowych), można tę całkę obliczyć. Bo dla zmiennych rzeczywistych wiemy, jak się liczy całki gaussowskie (z Exponensu od formy kwadratowej) – a dużym ułatwieniem jest, jeśli macierz tejże formy kwadratowej jest *cykliczna*. Okazuje się, że w przypadku grassmanowskim można postępować podobnie. Będziemy rozważać tu model Isinga z p.b.c.

Przechodzimy najspierw od zmiennych "położeniowych" do "pędowych", definiowanych jako:

$$\begin{aligned}
 H_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{\sqrt{|\Lambda_M|}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{H}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, & \bar{H}_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{\sqrt{|\Lambda_M|}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\bar{H}}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, \\
 V_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{\sqrt{|\Lambda_M|}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{V}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}, & \bar{V}_{\mathbf{R}} &= \frac{1}{\sqrt{|\Lambda_M|}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\bar{V}}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}},
 \end{aligned} \tag{75}$$

Zamiana zmiennych poprzedzona pytaniem motywacyjnym/sprawdzającym, jakie są wektory i wartości własne macierzy cyklicznych; w dwu sytuacjach:

- gdy zbiór wskaźników jest jednowymiarowy,
- gdy zb. wskaźników jest więcej niż jednowymiarowy.
- Co nieco też o dyskretnej delcie Kroneckera.

Przekonujemy się bezpośrednim rachunkiem, że działanie (73) w zmiennych 'pędowych' (indeksowanych przez \mathbf{k}) ma postać:

$$S(t) = \sum_{\mathbf{k}} \left[t\hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}}e^{ik_x} + t\hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}}e^{ik_y} \right. \\ \left. + \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} + \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}} + \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} + \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} + \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}} + \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} \right] \quad (76)$$

Popatrzmy bliżej, jak wyglądają poszczególne człony działania $S(t)$ przy zamianie zmiennych. Rozważmy najsamprzód jakiś człon bez czynnika t , np. $V_{\mathbf{R}}H_{\mathbf{R}}$. Mamy:

$$\sum_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} V_{\mathbf{R}}H_{\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} \frac{1}{|\Lambda_M|} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{V}_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \hat{H}_{\mathbf{k}'}e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}'} \frac{1}{|\Lambda_M|} \sum_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}} \\ = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}'}\delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}}$$

Można zapytać – sądząc po tym członie – czy zamiana zmiennych (75) nie jest zamianą typu 'zamienił stryjek siekierkę na kijek', skoro w zm. położeniowych były człony *diagonalne* w \mathbf{R} , a w \mathbf{k} już diagonalne nie są. Ale jest to prosta postać niediagonalności; a poza tym przypatrzmy się zasadniczym członom – niediagonalnym w \mathbb{R} , czyli z czynnikiem t . Zanim je policzymy, najpierw jawnie wypiszmy, że $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ oraz: $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = k_x R_x + k_y R_y$. Mamy:

$$\sum_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} \bar{H}_{\mathbf{R}}H_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_x} = \sum_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} \frac{1}{|\Lambda_M|} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{H}_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \hat{H}_{\mathbf{k}'}e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}+\mathbf{e}_x)} \\ = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}'} \frac{1}{|\Lambda_M|} \sum_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}} e^{-ik'_x} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{\mathbf{k}'}\delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} e^{-ik'_x} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}}e^{ik_x}$$

Przepiszmy teraz działanie w zmiennych 'pędowych' dla modelu Isinga (76) w bardziej symetrycznej postaci. Umówmy się, że $\mathbf{k} > 0$, jeśli *pierwsza składowa* \mathbf{k} jest większa od zera: $k_x > 0$. Wtedy możemy przepisać (76) jako:

$$S(t) = \sum_{\mathbf{k} > 0} \left[t\hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}}e^{ik_x} - t\hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}}e^{-ik_x} + t\hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}}e^{ik_y} - t\hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}}e^{-ik_y} \right. \\ \left. + \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} - \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} + \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}} - \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}} + \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} - \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}} \right. \\ \left. + \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} - \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}} + \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}} - \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} + \hat{V}_{\mathbf{k}}\hat{H}_{-\mathbf{k}} - \hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{V}_{-\mathbf{k}} \right] \\ \equiv \sum_{\mathbf{k} > 0} \Psi_{\mathbf{k}}^T M_{\mathbf{k}} \Psi_{-\mathbf{k}}, \quad (77)$$

gdzie $\Psi_{\mathbf{k}}$, $M_{\mathbf{k}}$ są zdefiniowane jako:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^T \equiv (\hat{H}_{\mathbf{k}}, \hat{H}_{\mathbf{k}}, \hat{V}_{\mathbf{k}}, \hat{V}_{\mathbf{k}})$$

oraz

$$M_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 + te^{ik_x} & -1 & -1 \\ -(1 + te^{-ik_x}) & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 + te^{ik_y} \\ 1 & 1 & -(1 + te^{-ik_y}) & 0 \end{bmatrix}.$$

Uwaga. Co nieco we wzorze (77) zaniedbaliśmy (tzn. wyrazy, gdzie $k_x = 0$; ale jest to *małe* conieco, bo znika w granicy TD, którą liczymy.

Tak więc!! Całka wchodząca do sumy statystycznej jest równa (z dokładnością do znaku – i zaniedbanych członów):

$$\int e^{S(t)} \prod_{\mathbf{R} \in \Lambda_M} dV_{\mathbf{R}} dH_{\mathbf{R}} d\bar{V}_{\mathbf{R}} d\bar{H}_{\mathbf{R}} = \prod_{\mathbf{k} > 0} \left[\int e^{\Psi_{\mathbf{k}}^T M_{\mathbf{k}} \Psi_{-\mathbf{k}}} d\hat{H}_{\mathbf{k}} d\hat{H}_{-\mathbf{k}} d\hat{H}_{\mathbf{k}} d\hat{H}_{-\mathbf{k}} d\hat{V}_{\mathbf{k}} d\hat{V}_{-\mathbf{k}} d\hat{V}_{\mathbf{k}} d\hat{V}_{-\mathbf{k}} \right] = \prod_{\mathbf{k} > 0} \det M_{\mathbf{k}}. \quad (78)$$

W ostatniej równości skorzystaliśmy z wzoru (68). Musimy teraz jawnie wykalkulować wyznacznik $\det M_{\mathbf{k}}$, który okazuje się być równym

$$\begin{aligned} \det M_{\mathbf{k}} &= (1 + 2t \cos k_x + t^2) (1 + 2t \cos k_y + t^2) - 4t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t^2 \cos k_x \cos k_y \\ &= (1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos k_x + \cos k_y). \end{aligned} \quad (79)$$

Teraz możemy przejść do granicy TD:

$$\begin{aligned} -\beta f &= \lim_{M \rightarrow \infty} \ln Z_{M \times M} \\ &= \ln(2 \cosh^2 \beta J) + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \ln \left[(1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos k_x + \cos k_y) \right] \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \ln \left[4 \left(\cosh^2 2\beta J - \sinh 2\beta J (\cos k_x + \cos k_y) \right) \right] \end{aligned} \quad (80)$$

gdzie ostatni wzór – to *wzór Onsagera* – a raczej jeden z nich; bo Onsager podał też inną postać. Czasem jedna jest wygodniejsza, czasem inna. Teraz bliżej się przyjrzymy tej drugiej postaci.

Ale najspierw przyjrzymy się wzorowi (80) pod kątem *analizy*. Z twierdzeń o ciągłości, różniczkowalności, analityczności całek zależnych od parametru wnosimy, że energia swobodna, dana wzorem (80) *jest* analityczna (jako całka ze złożenia funkcji analitycznych, analitycznie zależących od parametru) – *chyba że* argument logarytmu będzie zerowy! Tu argument jest *nieujemny*, ale może być *równy* zeru. Przyjrzymy się, kiedy to może mieć miejsce: Najmniejsza wartość argumentu jest, gdy $\cos k_x + \cos k_y = 2$, mamy

$$\cosh^2 2\beta J - 2 \sinh 2\beta |J| = 1 + \sinh^2 2\beta J - 2 \sinh 2\beta |J|$$

co się zeruje dla $\beta = \beta_c$ takiej, że

$$\sinh 2\beta_c |J| = 1 \quad (81)$$

co odpowiada

$$|K_c| \equiv \beta_c |J| = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \quad (82)$$

Powyższa temp. krytyczna okazuje się być równa temperaturze, pojawiającej się przy innej argumentacji, opartej na *samoorganizacji* sieci kwadratowej i związanych z tym relacjami pomiędzy wyrażeniami: nisko- i wysokotemperaturowym. (Nie jest jasne *a priori*, że obie te temp. krytyczne mają być równe – ale okazuje się, że są).

Uwaga techniczna: Mamy warunek $J < 0$; weźmy $J \rightarrow -J$ i piszmy w związku z tym: $x = e^{-2\beta J}$, $t = \tanh \beta J$.

Przypomnijmy sobie wzór (39) na sumę statystyczną w zmiennej 'niskotemperaturowej' $x = e^{-2\beta J}$:

$$Z_{N \times N} = 2x^{-N^2} \sum_k A_k x^k, \quad x = e^{-2\beta J} \equiv e^{-2K}$$

oraz (72) w zmiennej 'wysokotemperaturowej' $t = \tanh \beta J$:

$$Z_{N \times N} = (2 \cosh^2 K)^{N^2} \sum_k A_k t^k,$$

Stąd mamy wyrażenia na energie swobodne (po zaniedbaniu wyrazów brzegowych, które znikają w granicy TD):

LT:

$$-\beta f = -\log x + \Phi(x) = 2K + \Phi(x),$$

gdzie oznaczyliśmy:

$$P(x) = \ln \sum_k A_k x^k, \quad \Phi(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^2} \log P(x)$$

oraz HT:

$$-\beta f = \log(2 \cosh^2 K) + \Phi(t).$$

Weźmy teraz dwie (odwrotne) temperatury β_1, β_2 takie, że:

$$x(\beta_1) = t(\beta_2), \quad \text{czyli} \quad e^{-2\beta_1 J} = \tanh \beta_2 J$$

Wtedy mamy:

$$-\beta_1 f(\beta_1) = 2\beta_1 J + \Phi(x), \quad -\beta_2 f(\beta_2) = \ln(2 \cosh^2 \beta_2 J) + \Phi(x),$$

z czego możemy wyeliminować $\Phi(x)$ i otrzymać *związek pomiędzy energiami swobodnymi w różnych temperaturach*:

$$-\beta_1 f(\beta_1) - 2\beta_1 J = -\beta_2 f(\beta_2) - \ln(2 \cosh^2 \beta_2 J) \quad (83)$$

(Można ten związek zapisać w bardziej symetrycznej i ogólniejszej postaci – ciekawi Czytelnicy mogą to znaleźć u Baxtera w rozdz. 6).

'Co by było gdyby' udało się znaleźć taką (odwrotną) temperaturę β_* , że $x(\beta_*) = t(\beta_*)$? Z warunku:

$$e^{-2\beta_* J} = \tanh(\beta_* J)$$

otrzymujemy

$$\beta_* J = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2})$$

a jest to dokładnie warunek krytyczności (81).

Zauważmy jeszcze, że korzystając ze związku (83) możemy znaleźć energię swobodną w temp. krytycznej! Bez żadnych całek grassmanowskich czy innych technik. Ale otrzymujemy w ten sposób en. sw. dla *izolowanej* wartości temperatury – a interesuje nas zazwyczaj zależność en. swobodnej od parametrów (temperatura, pole magnetyczne).

6.3.5 Inne postaci energii swobodnej; inne obserwable

• Przejście od całki dwuwymiarowej do jednowymiarowej; narzędzie: Wzór Onsagera.

• Zrózniczkowanie i otrzymanie wyrażenia na en. wewn. ciepło wł. wyrażalnych przez EliPtysie;

• Wykres ciepła wł.

• Proste zabawy z EliPtysiami i logarytmiczna rozbieżność ciepła wł. w temp. krytycznej

• • Wzmianka że dla Isinga kalkulowalna jest spontaniczna magnetyzacja i że jest ona 0 dla $T > T_c$ i że:

$$m^2 = \sqrt[4]{1 - \frac{1}{\sinh^2 2K}} \quad \text{dla } T < T_c$$

• • Uwagi że kosztem większej ilości rachunków można otrzymać wyrażenia ścisłe dla *dowolnego* N. Policzone dużo ale ciągle SA nietrywialne i ciekawe rzeczy niepolczone.

Temat trudny ale aktualny, np. praca dokt. P. Nowakowskiego tego właśnie dotyczyła, w kontekście zjawisk zwilżania

••• Rzeczy których dotąd nikt NIE skalkulował, a przynajmniej nie opublikował: -) Podatność (w zerowym polu magn.); -) 2d model Isinga w *niezerowym* polu magn. (związek z rozkładem liczb pierwszych – Barouch: Gdyby był znany rozkład liczb pierwszych, to dałoby się przezeń wyrazić sumę statystyczną...); -) 3d model Isinga.

6.4 Inne modele

Przy użyciu całkowania po zmiennych grassmanowskich można wyrazić sumy statystyczne wielu układów sieciowych, zarówno klasycznych jak i kwantowych:

Układy klasyczne:

- 2d model Isinga z oddziaływaniami dalszego zasięgu i/lub (parzystymi) wielospinowymi: W działaniu obecne są 2. i wyższe (parzyste) potęgi zmiennych grassmanowskich.
- Podobnie: model Potts'a, Ashkina-Tellera oraz model Isinga w wyższych wymiarach.
- Model Isinga w polu magnetycznym: Fermionowa teoria pola z cechowaniem \mathbb{Z}_2 . (więcej szczegółów tu nie będzie – aby podniecić ciekawość).

Układy kwantowe:

- Model Heisenberga
- Model Hubbarda.

W działaniu obecne są 2. i wyższe potęgi zmiennych grassmanowskich.

Obecność członów rzędu wyższego niż drugi zazwyczaj uniemożliwia uzyskanie ścisłych rozwiązań. **Ale...**

Grupa renormalizacyjna

Jeśli stała sprzężenia jest mała, to można ściśle badać układy metodą *grupy renormalizacyjnej*.

Przykłady:

- 2d model Isinga z *małymi* oddziaływaniami dalszego zasięgu bądź wielospinowymi. Metodami RG pokazano **uniwersalność** zachowania krytycznego (Pinson, Spencer; J.W.(?))

Tu wstępne dywagacje o uniwersalności.

- Model Ashkina-Tellera z *małym* oddziaływaniem czterospinowym. Pokazano *nieuniwersalne* zachowanie krytyczne (Mastropietro, Giuliani)
- Model Hubbarda dla *małego* ilorazu U/t (t – stała hoppingu, U – moc oddziaływania kulombowskiego). Sporo ścisłych wyników dotyczących zachowania typu cieczy Fermiego bądź jego braku, czy też cieczy Luttingera (Mastropietro; Rivasseau; Salmhofer). **W szczególności!** Zachowanie typu cieczy Fermiego w modelu na sieci heksagonalnej – związek z własnościami *grafenu*.
- Osłabiając rygor matematyczny, można numerycznie badać równania RG pod kątem zachowania *podatności* (gdy się ona rozbiega, sugeruje to istnienie przejścia fazowego). W ten sposób badano model Hubbarda w przybliżeniu jednopętlowym i otrzymano diagram fazowy 2d modelu Hubbarda; obecne tam fazy: ferromagnetyczna, antyferromagnetyczna, nadprzewodząca (Metzner, Salmhofer, Honerkamp).

6.5 Zadania

1. Pokazać tożsamość Onsagera: Dla $x \geq 0$ mamy

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln(2 \cosh x - 2 \cos k) dk = x.$$

2. Używając jej, wykazać, że równoważne są wzory na energię swobodną: jako całka dwuwymiarowa dana przez wzór (80), oraz jako całka jednowymiarowa:

$$-\beta f = \frac{1}{2} \ln \sinh 2K + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \epsilon(k) dk,$$

gdzie $\epsilon(k)$ dane jest wzorem

$$\cosh \epsilon(k) = \cosh 2\tilde{K} \cosh 2K + \cos k,$$

zaś \tilde{K} wiąże się z K wzorem: $\sinh 2\tilde{K} \sinh 2K = 1$, i .

3. Wyrazić energię wewnętrzną modelu Isinga przez całkę eliptyczną. **Odp.:**

$$u = J \coth 2K \left(1 + \frac{2}{\pi} (2 \tanh^2 2K - 1) K_1(q) \right),$$

gdzie $q = 2 \frac{\sinh 2K}{\cosh^2 2K}$, zaś $K_1(k)$ jest *całką eliptyczną zupełną*:

$$K_1(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}}$$

4. Znaleźć wyrażenie na energię swobodną *anizotropowego* modelu Isinga na sieci kwadratowej, tzn. ze stałymi sprzężenia J_h (w kierunku poziomym) i J_v (w kierunku pionowym). (Wykorzystać całki grassmanowskie; odpowiedź podać w postaci analogicznej do wzoru (80)).
5. Znaleźć wyrażenie na energię swobodną anizotropowego modelu Isinga na sieci heksagonalnej. *Wsk.* Rozpatrzyć ogólniejszy model anizotropowy z czterema stałymi sprzężenia, równymi na plakietce o wierzchołkach w węzłach x, y, z, t : $J_{xy}, J_{yz}, J_{zt}, J_{tx}$ i przesuwanyymi o wektory $(1, 1)$ i $(2, 0)$. Zobaczyć dla jakiego zestawu stałych otrzymuje się sieć heksagonalną. Wykorzystać całki grassmanowskie. Przy przejściu do zmiennych 'pędowych' zmodyfikować transformatę Fouriera tak, by uwzględnić periodyczność o okresie 2.

7 Elementy kwantowej mechaniki statystycznej

7.1 Przestrzeń stanów, suma statystyczna, średnie

W mechanice klasycznej przestrzenią stanów na jednym węźle był skończony zbiór lub rozmierność.

- W mechanice kwantowej, przestrzenią stanów na węźle i jest *przestrzeń Hilberta* \mathcal{H}_i (skończenie- lub nieskończenie wymiarowa; będziemy mieć do czynienia głównie z tymi pierwszymi), a stany układu są wektorami (dokładniej, promieniami) w tej przestrzeni.

- Przestrzenią Hilberta układu określonego na zbiorze węzłów $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ jest *iloczyn tensorowy*:

$$\mathcal{H}_\Lambda = \bigotimes_{i \in \Lambda} \mathcal{H}_i \quad (84)$$

Jeżeli $\dim H_i = k$, to $\dim H_\Lambda = k^{|\Lambda|}$.

Baza układu (naturalny wybór – oczywiście nie jedyny możliwy) jest iloczynem tensorowym baz na węzłach.

- Układ zadajemy przez zadanie *hamiltonianu* H_Λ – operatora samosprzężonego na \mathcal{H}_Λ . Wartości własne \mathcal{H}_Λ są dopuszczalnymi wartościami energii układu.

W sytuacjach, z którymi będziemy mieć do czynienia, \mathcal{H}_i jest skończeniowym i H_Λ jest operatorem *ograniczonym*.

Przykład. Model Heisenberga i model Isinga (oba o spinie $\frac{1}{2}$).

Przykład. Diagonalizacja Ham'ów dla ukł. dwóch spinów. Sprawdzenie, że dla Isinga q otrzymuje się to samo, co dla Isinga c .

- *Sumę statystyczną* układu definiujemy jako

$$Z_\Lambda = \text{Tr}(e^{-\beta H_\Lambda}) = \sum_i e^{-\beta E_i}; \quad (85)$$

tu $\beta = \frac{1}{k_B T}$, zaś $\{E_i\}$ jest zbiorem energii własnych hamiltonianu \mathcal{H}_Λ .

- Obserwable określone są przez *operatory samosprzężone* na H_Λ . (Potrzeba wymusza też rozpatrywanie operatorów niesamosprzężonych; np. okazuje się, że jakiś operator s.s. jest iloczynem operatorów nie-s.s., które warto rozważać oddzielnie). Wartość średnia operatora A jest równa

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(A e^{-\beta H}) \quad (86)$$

(nie będziemy pedantycznie dopisywać indeksu $(\)_\Lambda$, wracając do tej notacji w razie potrzeby).

- Zdefiniujemy *macierz gęstości*:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad (87)$$

Uwaga: Termin 'macierz gęstości' może też mieć inne znaczenia.

Mamy:

$$\text{Tr} \rho = 1,$$

Wartość średnią operatora A możemy równoważnie zapisać

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(A \rho) = \text{Tr}(\rho A).$$

Mamy też:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = (\langle H \rangle - H) \rho.$$

Bo: Policzmy:

$$\begin{aligned}\frac{\partial Z}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta} \text{Tr} \left(I - \beta H + \frac{\beta^2}{2!} H^2 + \dots \right) = \text{Tr}(-H + \beta H^2 - \frac{1}{2!} \beta^2 H^3 + \dots) \\ &= \text{Tr}[-H(I - \beta H + \frac{\beta^2}{2!} H^2 + \dots)] = -Z \langle H \rangle;\end{aligned}$$

stąd

$$\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = \left(\frac{\partial}{\partial \beta} Z^{-1} \right) e^{-\beta H} - \frac{1}{Z} H e^{-\beta H} = \left(-\frac{1}{Z^2} \right) (-Z \langle H \rangle) e^{-\beta H} - H \rho = (\langle H \rangle - H) \rho.$$

? Uwaga o tym, że układy klasyczne można uważać za szczególne przypadki ukł. kwantowych, gdy wszystkie operatory są diagonalne?

7.2 Funkcje termodynamiczne

• *Energia swobodna.* Jak i w mech. klasycznej, definiujemy ją jako

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z.$$

• *Energia wewnętrzna:*

$$U = \langle H \rangle = \frac{\partial \beta F}{\partial \beta},$$

czyli mamy wzór analogiczny jak w mechanice klasycznej.

Bo:

$$\frac{\partial \beta F}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z) = -\frac{1}{Z} (-Z \langle H \rangle) = \langle H \rangle = U.$$

• *Magnetyzacja:*

Niech H będzie hamiltonianem opisującym jakieś oddziaływanie między spinami (model Heisenberga, Isinga lub jeszcze inny). Zmodyfikujmy Ham'a następująco: $H \rightarrow H - BM$, gdzie B – pole magnetyczne, zaś $M = \sum_i s_i^z$. (s_i^z jest operatorem z -towej składowej spinu; jeśli np. mamy układ spinów $\frac{1}{2}$, to s_i^z jest z -ową macierzą Pauliego).

Mamy:

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial B} &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln \text{Tr} e^{-\beta H + \beta BM} = -\frac{1}{\beta Z} \frac{\partial}{\partial B} \text{Tr} e^{-\beta(H-BM)} \\ &= -\frac{1}{\beta Z} \text{Tr} \left[\frac{\partial}{\partial B} \left(I - \beta(H-BM) + \frac{\beta^2}{2} (H-BM)^2 + \dots \right) \right]\end{aligned}$$

Uwaga! Różniczkujemy iloczyn operatorów na ogół *nieprzemiennych!*

$$= -\frac{1}{\beta Z} \text{Tr} \left[\beta M + \frac{\beta^2}{2} (-M(H-BM) - (H-BM)M) + \dots \right]$$

ale pod śladem możemy cyklicznie przestawiać

$$\begin{aligned}&= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[M - \beta(H-BM) + \frac{\beta^2}{2} (H-BM)^2 + \dots \right] \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[M \left(I - \beta(H-BM) + \frac{\beta^2}{2} (H-BM)^2 + \dots \right) \right] \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} (M e^{-\beta(H-BM)}) = -\langle M \rangle\end{aligned}$$

więc znowu taki sam wzór jak w wersji klasycznej. Ale, **uwaga!** Widzimy, że nieprzemienność może tu namieszać; i tak np. wzór na podatność jest już *inny*, niż w wersji klasycznej. (wersja kwantowa będzie trochę później). Ale *nie dotyczy to* wzoru na pojemność cieplną! O tym już za moment, a na razie

- *Entropia*. Mamy:

$$U = \frac{\partial(\beta F)}{\partial\beta} = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = F + \beta \frac{\partial F}{\partial\beta}$$

Bo: Przeliczmy, żeby raz gdzieś było:

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad T = \frac{1}{k_B \beta} \quad \text{więc} \quad \frac{\partial}{\partial\beta} = \frac{\partial T}{\partial\beta} \frac{\partial}{\partial T} = -\frac{1}{k\beta^2} \frac{\partial}{\partial T} = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T}$$

Zdefiniujmy *entropię*:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{1}{T}(U - F);$$

widzimy, że spełnia ona ten sam związek co w klasycznej mechanice statystycznej:

$$F = U - TS.$$

Entropia wyraża się przez macierz gęstości następująco:

$$S = -k_B \text{Tr}(\rho \ln \rho). \quad (88)$$

Bo:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho \ln \rho) &= \text{Tr} \left[\frac{1}{Z} e^{-\beta H} \ln \left(\frac{1}{Z} e^{-\beta H} \right) \right] = \text{Tr} \left[\frac{1}{Z} e^{-\beta H} (-\ln Z + \ln e^{-\beta H}) \right] \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H} (-\ln Z)) + \text{Tr} \left(\frac{1}{Z} e^{-\beta H} \right) = -\ln Z - \beta \frac{1}{Z} \text{Tr}(H e^{-\beta H}) \\ &= \beta F - \beta \langle H \rangle = \beta F - \beta U = \frac{1}{k} \frac{F - U}{T} = -\frac{1}{k} S. \end{aligned}$$

- Ciepło właściwe: Używając definicji, i związków wyprowadzonych dopiero co, mamy:

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} (TS + F) = S + T \frac{\partial S}{\partial T} + \frac{\partial F}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}.$$

Ciepło właściwe można powiązać z *fluktuacjami* energii:

$$\begin{aligned} C &= \frac{\partial U}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial U}{\partial\beta} = -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial\beta} \left[\frac{\text{Tr}(H e^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \right] \\ &= -k\beta^2 \left[\frac{-\text{Tr}(H^2 e^{-\beta H})}{\text{Tr} e^{-\beta H}} (-) (-) \frac{[\text{Tr}(H e^{-\beta H})]^2}{[\text{Tr}(e^{-\beta H})]^2} \right] \\ &= k\beta^2 [\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2] = k\beta^2 \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle = k\beta^2 \langle (H - U)^2 \rangle \end{aligned}$$

8 Twierdzenie Mermina – Wagnera

8.1 Model Heisenberga

Pamiętamy Ham'a klasycznego modelu Heisenberga. Tam energia oddziaływania dwóch spinów klasycznych \vec{s}_1, \vec{s}_2 była:

$$E(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = J\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = J(s_1^x s_2^x + s_1^y s_2^y + s_1^z s_2^z); \quad (89)$$

tu s_i^α ($i = 1, 2; \alpha = x, y, z$) są składowymi wektora o długości 1.

Przechodząc od klasycznego do kwantowego modelu Heisenberga, zastępujemy s_i^α przez *operatory* odpowiednich składowych α spinu na węźle i . Np. gdy mamy do czynienia ze spinem $\frac{1}{2}$, to operatorami składowych spinu są macierze Pauliego $\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$. Wyrażenie (89) trzeba wtedy zastąpić przez

$$h_{12} = J(s_1^x \otimes s_2^x + s_1^y \otimes s_2^y + s_1^z \otimes s_2^z) \quad (90)$$

Często przy zapisie pomija się znak iloczynu tensorowego.

Tu trochę historii modelu Heisenberga

Wersja klasyczna modelu była chyba znana przed powstaniem mechaniki kwantowej – bo dipole oddziałują między sobą (przy ustalonej odległości, znacznie większej od rozmiaru dipoli) dokładnie tak, jak zapodaje wzór (89), i trudno przypuścić, aby gazu dipoli nie badano; wykładowca nie zmobilizował się jednak do odnalezienia dokładniejszych danych. Co do modelu *kwantowego*, to Ham (90) pojawił się niedługo po powstaniu mechaniki kwantowej. Heisenberg zauważył, że oddziaływanie dwu atomów o spinie s (równym, powiedzmy, $\frac{1}{2}$) można opisać Ham'em (90). (Zakłada się, że atomy są położone niezbyt blisko siebie). Efekt ten związany jest z *antysymetrią* funkcji falowej. Heisenberg początkowo myślał, że uzyskał w ten sposób wyjaśnienie zjawiska ferromagnetyzmu; sprawa nie przedstawia się jednak tak prosto. Bloch (1929) zauważył, że po pierwsze, oddziaływanie (90) w typowych przypadkach jest *antyferromagnetyczne*; a po drugie, jest o wiele *za słabe* (spontaniczna magnetyzacja znikałaby w kilkudziesięciu, a nie kilkuset stopniach Kelvina). Na przekonujące wyjaśnienie ferromagnetyzmu metalicznego trzeba było czekać ponad pół wieku. Natomiast model Heisenberga szybko znalazł zastosowanie do opisu uporządkowania *antyferromagnetycznego* w izolatorach, gdzie to uporządkowanie dość często występuje.

Czy tu wstępnie podać o czym mówi tw. M-W?

8.2 Nierówność Bogolubowa

]Niech \mathcal{H} – przestrzeń Hilberta; tu: bierzemy przestrzeń stanów układu N spinów S .

Niech A, C, H – operatory na \mathcal{H} (tzn. elementy $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ – przestrzeni ograniczonych operatorów na \mathcal{H}). Zakładamy że H jest hermitowski; tu: H jest hamiltonianem układu.

Kilka uwag technicznych dotyczących sprzężenia i operatorów sprzężonych.

Niech $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, gdzie \mathcal{H} jest przestrzenią Hilberta, a A – op. liniowym. Mówimy, że operator A^\dagger jest *sprzężony* do A , jeśli dla dowolnych $x, y \in \mathcal{H}$ zachodzi:

$$(x, Ay) = (A^\dagger x, y)$$

(tu (\cdot, \cdot) jest iloczynem skalarnym w \mathcal{H}).

Niech a_{ij} oznacza element macierzowy operatora A w jakiejś bazie $\{i\}$, tzn.

$$a_{ij} = (i, Aj)$$

Na elementy macierzowe operatora sprzężonego A^\dagger mamy wtedy

$$a_{ij}^\dagger \equiv (i, A^\dagger j) = \overline{(A^\dagger j, i)} = \overline{(j, Ai)} = \overline{a_{ji}}.$$

Twierdzenia Mermin-Wagnera dowodzi się, odpowiednio używając *nierówności Bogolubowa*, która zapodaje, co następuje.

Tw. (*Nierówność Bogolubowa.*) Dla dowolnych operatorów A, C, H zachodzi

$$\frac{\beta}{2} \langle AA^\dagger + A^\dagger A \rangle \langle [[C, H], C^\dagger] \rangle \geq |\langle [C, A] \rangle|^2. \quad (91)$$

(tu: A^\dagger – sprzężenie hermitowskie A).

Pytanie sprawdzające czujność słuchaczy: Po lewej stronie nierówności Bogolubowa pojawia się β , a po prawej nie. Czy więc równość ma szanse zachodzić, przynajmniej dla małych β ?

Dowód. Wprowadźmy najsamprzód następującą funkcję określoną dla pary operatorów A, B :

$$Z(A, B) = \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} \overline{(i, Aj)} (i, Bj) \frac{e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}}{E_j - E_i} \quad (92)$$

Tutaj: e_i, E_i – stany własne i odpowiadające im energie własne H . (Dla skrócenia będziemy pisać $i \equiv e_i$ prawie wszędzie dalej; więc np. $(i, j) \equiv (e_i, e_j)$, $a_{ij} \equiv (e_i, Ae_j)$). Zbiór stanów własnych jest układem *zupelnym*. Sumowanie $\sum'_{i,j}$ przebiega po wszystkich parach (i, j) , dla których $i \neq j$ (dlatego jest znaczek prim przy sumie). Jeśli dla jakiejś pary i, j zachodzi $E_i = E_j$, to zamiast ułamka $\frac{e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}}{E_j - E_i}$ bierze się granicę, gdy $E_j \rightarrow E_i$, równą $\beta e^{-\beta E_i}$.

?? Coś nt. motywacji definicji?? Ale tylko zgrubnie, bo $Z(\cdot, \cdot)$ będzie jeszcze występowała w c.d.

Własności $Z(A, B)$.

1. $Z(A, B)$ jest półtoraliniowe względem A i B . (Chyba widać od razu).
2. $Z(A, A) \geq 0$ dla dowolnego A . (Chyba też widać).
3. $\overline{Z(A, B)} = Z(B, A)$. (Widoczne także).
4. $\overline{Z(A, B)} = Z(A^\dagger, B^\dagger)$. To pokażemy:

$$Z(A, B) = \sum'_{i,j} \overline{a_{ij}} b_{ij} \frac{e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}}{E_j - E_i} = \sum'_{i,j} \overline{a_{ji}^\dagger} b_{ji}^\dagger \frac{e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}}{E_j - E_i} = \overline{Z(A^\dagger, B^\dagger)}.$$

Własności 1. – 3. mówią, że są spełnione wszystkie aksjomaty *iloczynu skalarnego* (na $\mathcal{B}(\mathcal{H})$). Spełniona jest więc *nierówność Schwarz*:

$$|Z(A, B)|^2 \leq Z(A, A) Z(B, B). \quad (93)$$

Weźmy teraz za A dowolny operator, zaś za B – komutator:

$$B = [C^\dagger, H]$$

Wtedy mamy:

$$\begin{aligned}
Z(A, [C^\dagger, H]) &= \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} \overline{(i, Aj)} (i, (C^\dagger H - HC^\dagger)j) \frac{e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}}{E_j - E_i} \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} \overline{(i, Aj)} (i, C^\dagger j) (E_j - E_i) \frac{e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}}{E_j - E_i} \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} \overline{(i, Aj)} (i, C^\dagger j) (e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}) \tag{94}
\end{aligned}$$

A teraz policzmy:

$$\langle [C^\dagger, A^\dagger] \rangle = \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum_i [(i, C^\dagger A^\dagger i) - (i, A^\dagger C^\dagger i)] e^{-\beta E_i}$$

Tu robimy znaną sztuczkę: Wstawiamy jedynekę $\mathbf{1} = \sum_i e_i^T e_i$ (to samo w, bardziej być może popularnej wśród mechaników kwantowych, notacji Diraca: $\mathbf{1} = \sum_i |i\rangle\langle i|$) i mamy, że powyższe wyrażenie jest równe

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum_{i,j} [(i, C^\dagger j)(j, A^\dagger i) - (i, A^\dagger j)(j, C^\dagger i)] e^{-\beta E_i} \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} [(i, C^\dagger j)(j, A^\dagger i) - (i, A^\dagger j)(j, C^\dagger i)] e^{-\beta E_i} \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} (i, C^\dagger j)(j, A^\dagger i) e^{-\beta E_i} - \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} (i, A^\dagger j)(j, C^\dagger i) e^{-\beta E_i} \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} (i, C^\dagger j)(j, A^\dagger i) e^{-\beta E_i} - \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} (j, A^\dagger i)(i, C^\dagger j) e^{-\beta E_j} \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} (i, C^\dagger j)(j, A^\dagger i) (e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}) \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum'_{i,j} \overline{(i, Aj)} (i, C^\dagger j) (e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j});
\end{aligned}$$

i otrzymujemy to samo co w (94), tak więc

$$Z(A, [C^\dagger, H]) = \langle [C^\dagger, A^\dagger] \rangle. \tag{95}$$

Ponadto:

$$Z([[C^\dagger, H], [C^\dagger, H]]) = \langle [C^\dagger, [H, C]] \rangle = \langle [[C, H], C^\dagger] \rangle \tag{96}$$

Bo: Wprost z wykazanej równości (96), dla $A = [C^\dagger, H]$ i z własności sprzężeń mamy:

$$Z([[C^\dagger, H], [C^\dagger, H]]) = \langle [C^\dagger, [C^\dagger, H]^\dagger] \rangle = \langle [C^\dagger, [H, C]] \rangle = \langle -[[H, C], C^\dagger] \rangle = \langle [[C, H], C^\dagger] \rangle$$

Ma miejsce następujące ograniczenie z góry na $Z(A, A)$:

$$Z(A, A) \leq \frac{1}{2} \beta \langle A A^\dagger + A^\dagger A \rangle. \tag{97}$$

Bo:

$$\begin{aligned}
Z(A, A) &= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum_{i,j} \overline{\langle (i, Aj) \rangle} (i, Aj) \frac{e^{-\beta E_i} - e^{-\beta E_j}}{E_j - E_i} \\
&= \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum_{i,j} \overline{\langle (i, Aj) \rangle} (i, Aj) \frac{e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}}{E_j - E_i} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (E_j - E_i) \right] \\
&\leq \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \sum_{i,j} \overline{\langle (i, Aj) \rangle} (i, Aj) (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}) \frac{\beta}{2} \\
&\leq \frac{\beta}{2} \frac{1}{\text{Tre}^{-\beta H}} \text{Tr} \left[(A A^\dagger + A^\dagger A) e^{-\beta H} \right] \\
&= \frac{1}{2} \beta \langle A A^\dagger + A^\dagger A \rangle.
\end{aligned}$$

Nieco szczegółów:

- Przy przejściu 1 \rightarrow 2, zamieniamy Exponensy na Hiperboliczne Tangensy, następująco. Nazywając $\beta E_i \equiv x$, $\beta E_j \equiv y$, mamy:

$$\begin{aligned}
e^{-x} - e^{-y} &= (e^{-x} + e^{-y}) \frac{e^{-x} - e^{-y}}{e^{-x} + e^{-y}} = (e^{-x} + e^{-y}) \frac{e^{\frac{x}{2} + \frac{y}{2}} (e^{-x} - e^{-y})}{e^{\frac{x}{2} + \frac{y}{2}} (e^{-x} + e^{-y})} = (e^{-x} + e^{-y}) \frac{e^{\frac{y}{2} - \frac{x}{2}} - e^{\frac{x}{2} - \frac{y}{2}}}{e^{\frac{y}{2} - \frac{x}{2}} + e^{\frac{x}{2} - \frac{y}{2}}} \\
&= (e^{-x} + e^{-y}) \tanh \left(\frac{y}{2} - \frac{x}{2} \right)
\end{aligned}$$

- Przy przejściu 2 \rightarrow 3, wykorzystujemy nierówność: $\tanh x \leq x$ (dla $x > 0$).

- Przy przejściu 3 \rightarrow 4, przechodzimy od sumy elementów macierzowych do śladu iloczynu macierzy analogicznie jak pół strony wyżej, tyle że w odwrotną stronę.

I już finał dowodu: Wstawiamy wzory (95), (96) do nierówności Schwarz'a (93) i wykorzystując (97) oraz jeszcze:

$$[C, A]^\dagger = -[C^\dagger, A^\dagger]$$

i

$$\langle [C, A] \rangle = \overline{\langle [C, A]^\dagger \rangle}$$

otrzymujemy nierówność Bogolubowa (91).

8.3 Twierdzenie Mermina-Wagnera: Brak LRO w dodatnich temperaturach w układach z symetrią ciągłą

Jak wspomniano, tw. M-W dowodzi się wykorzystując nierówność Bogolubowa. Teraz! Zastosujemy ją do odpowiednich operatorów. Ale najspierw powiemy, jakim modelem się zajmiemy.

Weźmy hamiltonian H w postaci:

$$H = H_0 + H_x, \tag{98}$$

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{\epsilon} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \right],$$

(tzn. H_0 - hamiltonian *anizotropowego modelu Heisenberga*, tzw. *XXZ*); $\epsilon > 0$;

$$H_x = h_x \sum_i S_i^x.$$

Zakładamy, że spin S jest taki sam dla wszystkich węzłów sieci; jego wartość jest dowolna. Zakładamy też translacyjną niezmienniczość (tzn. J_{ij} zależy tylko od różnicy $\mathbf{i} - \mathbf{j}$).

Zakładamy:

$$\sum_{\mathbf{j}} |J_{ij}| (\mathbf{i} - \mathbf{j})^2 \equiv J_2 < \infty \quad (99)$$

(dla dowolnego \mathbf{i} ; ze względu na translacyjną niezmienniczość wszystko jedno, jakie \mathbf{i} weźmiemy).

Tw. (Mermin, Wagner '66. W dowolnej niezerowej temperaturze spontaniczna magnetyzacja M_x (tak naprawdę, w dowolnym kierunku w płaszczyźnie xy) jest równa zero.

Dow.

Będzie potrzebne przejście do transformacji Fouriera zmiennych spinowych:

$$\hat{S}^z(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^z$$

(\mathbf{k} przebiega pierwszą strefę Brillouina), i analogicznie dla składowych x i y .

Dowód tw. Mermina-Wagnera opiera się na nier. Bogolubowa, ze stosownie dobranymi operatorami. Konkretnie,² weźmy w nierówności Bogolubowa operatory:

$$C = \hat{S}^z(\mathbf{k}), \quad A = \hat{S}^y(-\mathbf{k})$$

Ich komutator jest:

$$[C, A] = -i \sum_{\mathbf{i}} S_{\mathbf{i}}^x = -i \hat{S}^x(\mathbf{0}) = Nm^x, \quad (100)$$

gdzie $N = |\Lambda|$, zaś m^x jest magnetyzacją w kierunku x (w przeliczeniu na jeden spin). Bo: Przypomnijmy uprzednio dla porządku własności komutacyjne operatorów spinowych:

$$[S^i, S^j] = i\epsilon_{ijk} S^k,$$

ϵ_{ijk} – symbol zupełnie antisymetryczny. Wykorzystując te własności komutacyjne, mamy:

$$[C, A] = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{j}-\mathbf{i})} [S_{\mathbf{j}}^z, S_{\mathbf{i}}^y] = -i \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{j}-\mathbf{i})} S_{\mathbf{i}}^x \delta_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} = -i \sum_{\mathbf{i}} S_{\mathbf{i}}^x = -i S^x(\mathbf{0})$$

Tak więc powyższy komutator to *magnetyzacja* (w kierunku x).

Używając reguł komutacyjnych dla momentu pędu, liczymy komutator $[C, H]$:

$$\begin{aligned} [C, H] &= \left[S^z(\mathbf{k}), \frac{1}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} J_{ij} (\underbrace{S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x}_{II} + \underbrace{S_{\mathbf{i}}^y S_{\mathbf{j}}^y}_{III}) + \underbrace{h_x \sum_{\mathbf{i}} S_{\mathbf{i}}^x}_I \right] \\ &= \frac{i}{\epsilon} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} J_{jl} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} (\underbrace{S_{\mathbf{j}}^x S_{\mathbf{l}}^y}_{due} - \underbrace{S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{l}}^x}_{tre}) + \underbrace{ih_x \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^y}_{uno} \end{aligned} \quad (101)$$

Najsamprzaw policzmy komutator zawierający I :

$$\left[\sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} S_{\mathbf{l}}^z, h_x \sum_{\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^x \right] = h_x \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} [S_{\mathbf{l}}^z, S_{\mathbf{j}}^x] = ih_x \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} S_{\mathbf{l}}^y \delta_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} = ih_x \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^y = ih_x \sum_{\mathbf{j}} \hat{S}^y(\mathbf{k})$$

²Á propos słówka 'konkretnie' – anegdota S. Kisielewskiego: Zamawia gość w restauracji: – Poproszę szampan i owoce. – A konkretnie? – pyta kelner. – Konkretnie: Wódkę i ogórek!

Zanim policzymy komutator zawierający II, przypomnijmy sobie równość komutatorową: Dla dowolnych operatorów A, B, C mamy:

$$[A, BC] = ABC - BCA = ABC - BAC + BAC - BCA = [A, B]C + B[A, C],$$

oraz bliźniaczą równość

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B.$$

Stąd mamy dla komutatora zawierającego II:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} J_{\mathbf{mj}} [S_{\mathbf{l}}^z, S_{\mathbf{m}}^x S_{\mathbf{j}}^x] &= \frac{1}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} J_{\mathbf{mj}} [S_{\mathbf{l}}^z, S_{\mathbf{m}}^x] S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{m}}^x [S_{\mathbf{l}}^z, S_{\mathbf{j}}^x] \\ &= \frac{1}{2\epsilon} i \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} J_{\mathbf{mj}} (S_{\mathbf{m}}^y \delta_{\mathbf{l}\mathbf{m}} S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{m}}^x S_{\mathbf{l}}^y \delta_{\mathbf{l}\mathbf{j}}) = \frac{1}{2\epsilon} i \left(\sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} J_{\mathbf{l}\mathbf{j}} S_{\mathbf{l}}^y S_{\mathbf{j}}^x + \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} J_{\mathbf{mj}} S_{\mathbf{m}}^x S_{\mathbf{j}}^y \right) \\ &= \frac{i}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} \left(J_{\mathbf{l}\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} S_{\mathbf{l}}^y S_{\mathbf{j}}^x + J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} S_{\mathbf{l}}^x S_{\mathbf{j}}^y \right) = \frac{i}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} (J_{\mathbf{l}\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} S_{\mathbf{l}}^y S_{\mathbf{j}}^x + J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} S_{\mathbf{j}}^x S_{\mathbf{l}}^y) \\ &= \frac{i}{\epsilon} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} J_{\mathbf{l}\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} S_{\mathbf{j}}^x S_{\mathbf{l}}^y. \end{aligned}$$

Ostatni komutator zawierający III liczymy analogicznie, uwzględniając tylko, że $[S^z, S^y] = -iS^x$, i mamy

$$\frac{1}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{l}} \sum_{\mathbf{m}, \mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} J_{\mathbf{mj}} [S_{\mathbf{l}}^z, S_{\mathbf{m}}^y S_{\mathbf{j}}^y] = -\frac{1}{\epsilon} i \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} J_{\mathbf{l}\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{l}}^x.$$

Dodając wszystkie trzy komutatory, otrzymujemy wzów (101).

Będziemy potrzebować komutatora $[[C, H], C^\dagger]$, pojawiającego się w nier. Bogolubowa. Mamy:

$$C^\dagger = \hat{S}^z(-\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^z$$

Kalkulując bezpośrednio, okazuje się, że:

$$\begin{aligned} [[C, H], C^\dagger] &= \\ &= -\epsilon^{-1} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} J_{\mathbf{ij}} [1 - \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})] (S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{i}}^y S_{\mathbf{j}}^y) - h_x S^x(\mathbf{0}) \end{aligned} \quad (102)$$

Bo: Liczymy komutator zawierający *uno*:

$$ih_x \sum_{\mathbf{j}} \sum_{\mathbf{m}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} [S_{\mathbf{j}}^y, S_{\mathbf{m}}^z] = -h_x \sum_{\mathbf{j}} \sum_{\mathbf{m}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{j}-\mathbf{m})} S_{\mathbf{j}}^x \delta_{\mathbf{j}\mathbf{m}} = -h_x \sum_{\mathbf{j}} S_{\mathbf{j}}^x = -h_x \hat{S}^x(\mathbf{0}).$$

Teraz: Komutator zawierający *due*:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\epsilon} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} \sum_{\mathbf{m}} J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{m}\cdot\mathbf{k}} [S_{\mathbf{j}}^x S_{\mathbf{l}}^y, S_{\mathbf{m}}^z] &= \frac{i}{\epsilon} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} \sum_{\mathbf{m}} J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{m})} (S_{\mathbf{j}}^x [S_{\mathbf{l}}^y, S_{\mathbf{m}}^z] + [S_{\mathbf{j}}^x, S_{\mathbf{m}}^z] S_{\mathbf{l}}^y) \\ &= -\frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} \sum_{\mathbf{m}} \left(J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{m})} S_{\mathbf{j}}^x S_{\mathbf{l}}^y \delta_{\mathbf{l}\mathbf{m}} - J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{m})} S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{l}}^x \delta_{\mathbf{j}\mathbf{m}} \right) \\ &= -\frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{j}\mathbf{m}} J_{\mathbf{j}\mathbf{m}} S_{\mathbf{j}}^x S_{\mathbf{m}}^x + \frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{m}\mathbf{l}} J_{\mathbf{m}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{m})} S_{\mathbf{m}}^y S_{\mathbf{l}}^y \\ &= -\frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{j}\mathbf{l}} J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} S_{\mathbf{j}}^x S_{\mathbf{l}}^x + \frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{j}\mathbf{l}} J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{j})} S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{l}}^y. \end{aligned}$$

Oraz: Komutator zawierający *tre*. Jego struktura jest analogiczna jak *due*, z następującymi różnicami: -) znak minus, -) oraz zamiana rolami wskaźników x i y . Z własności komutacyjnych operatorów momentu pędu otrzymamy dodatkowy minus; a w wyniku końcowym trzeba też zamienić wskaźniki x na y i vice versa. Stąd mamy, że komutator zawierający *tre* jest

$$-\frac{i}{\epsilon} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{j}} \sum_{\mathbf{m}} J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} e^{-i\mathbf{m}\cdot\mathbf{k}} [S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{l}}^x, S_{\mathbf{m}}^z] = -\frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{j}\mathbf{l}} J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{l}}^y + \frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{j}\mathbf{l}} J_{\mathbf{j}\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{l}-\mathbf{j})} S_{\mathbf{j}}^x S_{\mathbf{l}}^x.$$

Zbierając do kupy wyrazy zawierające *uno*, *due* i *tre*, oraz korzystając z wyrażenia cosinusa przez expensy oraz symetrii cosinusa, otrzymujemy *summa summarum* wzór (102).

Zajmijmy się teraz antykomutatorem $\{A, A^\dagger\}$. Mamy:

$$\{A, A^\dagger\} \equiv A A^\dagger + A^\dagger A = S^y(-\mathbf{k}) S^y(\mathbf{k}) + S^y(\mathbf{k}) S^y(-\mathbf{k})$$

czyli mamy

$$\langle \{A, A^\dagger\} \rangle \equiv \langle A A^\dagger + A^\dagger A \rangle = \langle S^y(-\mathbf{k}) S^y(\mathbf{k}) + S^y(\mathbf{k}) S^y(-\mathbf{k}) \rangle; \quad (103)$$

w tej postaci na razie zostawimy, a oszacujemy, gdy będziemy sumować po \mathbf{k} .

Na razie zaś oszacujemy komutatory występujące w nierówności Bogolubowa.

Wyraz stojący z prawej strony: Mamy, ze względu na (100):

$$|\langle [C, A] \rangle|^2 = N^2 |m^x|^2. \quad (104)$$

Teraz prawa strona – szukamy ograniczeń z *góry*. Mamy:

$$\langle \langle [C, H], C^\dagger \rangle \rangle \leq N \left(|h_x| \cdot |m^x| + \frac{1}{\epsilon} |\mathbf{k}|^2 J_2 S^2 \right) \quad (105)$$

Bo: Pierwszy człon po prawej stronie jest ewidentny. Co do drugiego, to mamy łańcuszek oszacowań. Startujemy z:

$$\left\langle -\frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} J_{\mathbf{i}\mathbf{j}} [1 - \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})] (S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{i}}^y S_{\mathbf{j}}^y) \right\rangle.$$

Oznaczmy roboczo:

$$S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} \equiv -\frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} J_{\mathbf{i}\mathbf{j}} [1 - \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})] (S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{i}}^y S_{\mathbf{j}}^y).$$

Numerujemy stany własne Hama (98) literą K (czyli wekt. własne niech będą e_K), a odpowiednią sumę statystyczną przez \mathcal{Z} . Mamy:

$$\langle S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{K \in e.b.H} (e_K, S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} e_K) e^{-\beta E_K}$$

(przypomnijmy, że sumujemy po K – elementach bazy tworzonej przez wekt. własne Hama (98); tę sytuację oznaczyliśmy jako $K - e.b.H$.)

Teraz szacujemy $|\langle S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} \rangle|$ następująco:

$$\begin{aligned} |\langle S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} \rangle| &\leq \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{K \in e.b.H} \left(\max_{K \in e.b.H} |(e_K, S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} e_K)| e^{-\beta E_K} \right) \\ &= \max_{K \in e.b.H} |(e_K, S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} e_K)| \end{aligned}$$

$$\leq \max_{\text{all } e_K: \|e_K\|=1} |(e_K, S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} e_K)| \equiv \max_{\text{all } v: \|v\|=1} |(v, S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}} v)| \equiv \|S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}}\|$$

Do oszacowania normy $\|S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}}\|$ użyjemy standardowych nierówności normowych: $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ oraz $\|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ i dostajemy:

$$\begin{aligned} \|S_{\mathbf{k}}^{\text{XY}}\| &\leq \frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{ij}} |J_{\mathbf{ij}}| [1 - \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j})] \|(S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{i}}^y)\| \\ &\leq \frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{ij}} |J_{\mathbf{ij}}| \frac{1}{2} (\mathbf{k} \cdot (\mathbf{i} - \mathbf{j}))^2 \|(S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{i}}^y)\| \dots \end{aligned}$$

(tu skorzystaliśmy z nierówności $1 - \cos x \leq \frac{1}{2}x^2$)

$$\begin{aligned} \dots &\leq \frac{1}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{i}} \sum_{\mathbf{j}} |J_{\mathbf{ij}}| (\mathbf{i} - \mathbf{j})^2 \|(S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{i}}^y)\| \mathbf{k}^2 \\ &\leq \frac{1}{2\epsilon} \sum_{\mathbf{i}} \sum_{\mathbf{j}} |J_{\mathbf{ij}}| (\mathbf{i} - \mathbf{j})^2 2 S^2 \mathbf{k}^2 \dots \end{aligned}$$

Tu normę $\|(S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{i}}^y)\|$ oszacowaliśmy następująco:

$$\|(S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x + S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{i}}^y)\| \leq \|(S_{\mathbf{i}}^x S_{\mathbf{j}}^x)\| + \|(S_{\mathbf{j}}^y S_{\mathbf{i}}^y)\| \leq \|S^x\|^2 + \|S^y\|^2 = 2 S^2$$

i dalej:

$$\dots \leq \frac{1}{\epsilon} \sum_{\mathbf{i}} J_2 S^2 \mathbf{k}^2 = N \frac{1}{\epsilon} J_2 S^2 \mathbf{k}^2;$$

czyli, ostatecznie! otrzymujemy oszacowanie (105).

Wstawiając wyrażenia: (105), (104), (103) do nierówności Bogolubowa, otrzymamy:

$$\underbrace{\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{k}} \langle S^y(-\mathbf{k}) S^y(\mathbf{k}) + S^y(\mathbf{k}) S^y(-\mathbf{k}) \rangle}_{\frac{\beta}{2} \langle AA^\dagger + A^\dagger A \rangle} \cdot \underbrace{N \left(|h_x| \cdot |m^x| + \frac{1}{\epsilon} |\mathbf{k}|^2 J_2 S^2 \right)}_{\langle [C, H], C^\dagger \rangle} \geq \underbrace{N^2 (m^x)^2}_{\langle [C, A] \rangle^2}$$

Przekształcając nieco, a następnie sumując po \mathbf{k} otrzymujemy:

$$\begin{aligned} &\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{k}} \langle S^y(-\mathbf{k}) S^y(\mathbf{k}) + S^y(\mathbf{k}) S^y(-\mathbf{k}) \rangle \\ &\geq N (m^x)^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{|h_x| |M^x| + \eta |\mathbf{k}|^2 J_2 S^2}. \end{aligned} \quad (106)$$

Oszacujemy średnią z lewej strony:

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{\mathbf{k}} S^y(-\mathbf{k}) S^y(\mathbf{k}) + S^y(\mathbf{k}) S^y(-\mathbf{k}) \right\rangle &= 2N \sum_{\mathbf{j}} (S_{\mathbf{j}}^y)^2 \\ &\leq 2N^2 S(S+1). \end{aligned}$$

W granicy $N \rightarrow \infty$ można zastąpić sumę przez całkę:

$$\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{N}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} F(\mathbf{k}).$$

Mamy więc!!

$$\beta S(S+1) \geq \frac{(m^x)^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} \frac{1}{|h_x||m^x| + \frac{1}{\epsilon}|\mathbf{k}|^2 J_2 S^2} \quad (107)$$

czyli otrzymaliśmy (w ogólnym przypadku) *przestępną* (zwane też TRANSCENDENT-NA³) nierówność na m^x .

Całkując, otrzymujemy dla wymiarów 1 i 2 oszacowania na $|m^x|$:

8.3.1 $d = 1$

- Dla $|h_x|$ dostatecznie małych, mamy oszacowanie na m^x jako funkcję h_x oraz T :

$$|m^x| \leq C_1 \frac{|h_x|^{1/3}}{T^{2/3}}. \quad (108)$$

Bo: Obliczmy całkę we wzorze (107) dla $d = 1$. Mamy:

$$\beta S(S+1)(2\pi) \geq (m^x)^2 2 \int_0^\pi \frac{dk}{|h_x||m^x| + \frac{1}{\epsilon}k^2 J_2 S^2} = \dots$$

Wykładowca daruje tu sobie⁴ liczenie całki, licząc na to, że Czytelnik zechce sprawdzić rachunki

$$\dots = (m^x)^2 \frac{1}{\sqrt{|h_x||m^x|}} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\epsilon}J_2 S^2}} \arctg \frac{\sqrt{\frac{1}{\epsilon}J_2 S^2}}{\sqrt{|h_x||m^x|}} \geq (m^x)^2 \frac{1}{\sqrt{|h_x||m^x|}} \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\epsilon}J_2 S^2}};$$

ostatnia nierówność jest prawdziwa dla *dostatecznie małych* $|h_x|$, co wynika z oszacowania, że $\arctg x \geq 1$ dla dostatecznie dużego x .

Zaś interesujemy się asymptotyką zachowania $m^x(h_x)$ dla h_x bliskich zeru, więc powyższy zakres $|h_x|$ jest ok.

Mamy więc:

$$\frac{1}{k_B T} S(S+1) \pi^2 \sqrt{\frac{1}{\epsilon} J_2 S^2} \geq \frac{|m^x|^{3/2}}{|h_x|^{1/2}}$$

Oznaczając:

$$C_1^{3/2} = \frac{1}{k_B} S(S+1) \pi^2 \sqrt{\frac{1}{\epsilon} J_2 S^2},$$

otrzymujemy (108).

8.3.2 $d = 2$

- • Dla $|h_x|$ dostatecznie małych, mamy oszacowanie na m^x jako funkcję h_x oraz T :

$$d = 2 : |m^x| < C_2 \frac{1}{T^{1/2} |\ln |h_x||^{1/2}}. \quad (109)$$

³Por. uwagę sprzed kilkunastu stron na temat okoliczności występowania bliskiego fonetycznie słówka TRANSCENDENTALNE

⁴Podobnie jak Al – bohater negatywny w Toy Story 2 – darował sobie prysznic przed wyjazdem do Tokio

Bo: Jak i w poprzednim przypadku (jednowymiarowym), całkę po pędach można łatwo wyliczyć (bądź, bardziej precyzyjnie, przeprowadzić operacje będące skrzyżowaniem jawnego całkowania z oszacowaniami). Zapiszmy:

$$\begin{aligned} \beta S(S+1)(2\pi)^2 &\geq (m^x)^2 \int_{[0,\pi]^2} \frac{d^2\mathbf{k}}{|h_x||m^x| + \frac{1}{\epsilon}\mathbf{k}^2 J_2 S^2} \\ &\geq (m^x)^2 \int_{|\mathbf{k}|^2 \leq \pi} \frac{d^2\mathbf{k}}{|h_x||m^x| + \frac{1}{\epsilon}\mathbf{k}^2 J_2 S^2} \\ &= (m^x)^2 2\pi \int_0^\pi \frac{r dr}{|h_x||m^x| + \frac{1}{\epsilon}r^2 J_2 S^2} = \dots \end{aligned}$$

znów, jak i uprzednio, darujemy sobie liczenie całki

$$\dots = \frac{1}{2B} (m^x)^2 \ln \left(\frac{\pi^2 B}{|h_x||m^x|} \right)$$

gdzie $B = \frac{1}{\epsilon}\mathbf{k}^2 J_2 S^2$. Przepiszmy otrzymaną nierówność w postaci

$$\frac{C_2}{T} \geq (m^x)^2 \ln \left(\frac{\pi^2 B}{|h_x||m^x|} \right) \quad (110)$$

gdzie $C_2 = \dots$. Rozpatrzmy teraz dwie możliwości asymptotycznego (w pobliżu 0) zachowania m^x :

1. $\lim_{h_x \rightarrow 0} m^x = m_0 > 0$, (tak naprawdę zakładamy mniej, tzn. że granicy nie ma lub jeśli jest, to niezerowa),
2. $\lim_{h_x \rightarrow 0} m^x = m_0 = 0$.

Pierwsza z tych możliwości jest jednak sprzeczna z nierównością (110). Zapiszmy bowiem:

$$\begin{aligned} \frac{C_2}{T} &\geq (m^x)^2 (\ln(\pi^2 B) + |\ln |m^x|| + |\ln |h_x||) \\ &= ((\text{coś ograniczonego}) + |\ln |h_x||), \end{aligned}$$

co jest nieograniczone, gdy $h_x \rightarrow 0$. Zatem zachodzi możliwość pierwsza, z której mamy

$$\frac{C_2}{T} \geq (m^x)^2 (\ln(\pi^2 B) + |\ln |m^x|| + |\ln |h_x||) \geq (m^x)^2 |\ln |h_x||,$$

czyli oszacowanie (109).

8.3.3 Morał dla $d = 1$ i 2 :

Widać, że gdy $T \neq 0$, $\epsilon \neq 0$ (tzn. mamy anizotropowy model Heisenberga), to *nie ma spontanicznego namagnesowania w kierunku x* , ponieważ dla $h_x \rightarrow 0$ mamy $M_x \rightarrow 0$.

8.3.4 Pytanie sprawdzające czujność słuchaczy: Dlaczego w $d = 3$ dowód M-W 'nie idzie'?

... i iść nie może, bo w $d = 3$ jest LRO dla modeli Heisenberga (co wiadomo skądinąd).

Odp. Odpowiedzialne za to są własności całki stojącej po prawej stronie nierówności (107). Sprowadza się to do obserwacji, że całka:

$$I_0^d = \int \frac{d\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2} \quad (111)$$

jest *rozbieżna* w $d = 1$ i $d = 2$, natomiast *zbieżna* w $d = 3$ (i wyższych wymiarach).

??? Argument dla $h_x = 0$???

8.4 Uwagi, uogólnienia.

1. Hohenberg: Brak kondensacji Bosego-Einsteina (w układzie oddziaływujących bozonów) w $d = 1$ i $d = 2$, metodą bardzo podobną do wykorzystywanej w tw. M-W.
2. Powyżej była badana obecność uporządkowania ferromagnetycznego. Niewielka modyfikacja dowodu daje podobny wynik dla uporządkowania antyferromagnetycznego i innych uporządkowań periodycznych.
3. Sytuacja podobna jak w modelach Heisenberga (brak LRO w niezerowych temperaturach) ma miejsce w *modelu Hubbarda*. Znane jest to od początku lat 70 ub. wieku (Majumdar, Ghosh?). Prosty, chytry dowód podali Koma i Tasaki ('93).
4. Układy klasyczne: Też nie porządkują się w $T > 0$ w $d = 1$ i 2 . (Malyshev). Są też dalej idące uogólnienia, np. na przypadek ogólniejszych grup symetrii i braku szerszej klasy parametrów porządku (Wreszinski; Neves-Peres; ...)
5. Twierdzenie Mermina-Wagnera dotyczy temperatur *dodatnich*. Nie mówi nic o stanie podstawowym. Ten *może* być uporządkowany; tak jest np. dla modelu XY oraz anizotropowych modeli Heisenberga. Dowód: technika *odbiciowej dodatniości* (reflection positivity).

Otwarty problem: Istnienie uporządkowania antyferromagnetycznego w stanie podstawowym *izotropowego* modelu Heisenberga.

6. $d = 3$: Tu w dostatecznie niskich temperaturach układ *posiada uporządkowanie*, jeśli spin jest większy od $1/2$.

Otwarty problem: Istnienie uporządkowania antyferromagnetycznego dla spinu $1/2$ w izotropowym modelu Heisenberga w temperaturze dodatniej.

7. $d = 2$: Twierdzenie Mermina-Wagnera wyklucza uporządkowanie dalekiego zasięgu, ale nie wyklucza innych typów przejść fazowych. Należy do nich tzw. *przejście Kosterlitz-Thoulessa*, znalezione przez nich w modelu XY (a także równoważnych, bądź podobnych, modelach: dwuwymiarowa plazma, dwuwymiarowy model sin-Gordona, ... , .

8. Istotne jest założenie o tym, że stałe sprzężenia maleją dostatecznie szybko z odległością (warunek (99)); znaczy on np. że w $d = 2$, $J(\mathbf{r}) \sim r^{-(2+\alpha)}$, $\alpha > 0$). Okazuje się,

że gdy stałe sprzężenia maleją *wolniej*, to układ *wykazuje* przejście fazowe (Kunz, Pfister '76 – wersja klasyczna; FILS '78 – wersja kwantowa).

Otwarty problem: Czy istnieje LRO w dodatnich temperaturach w układach z oddziaływaniem RKKY ($J(r) \sim r^{-3} \cos(\eta r)$)? (w $d = 3$; w $d = 2$, zależność $J(r)$ wygląda inaczej; UZUP. – TU POWINIEN BYĆ STOSOWNY WZÓR) Pytanie pojawia się w kontekście możliwego zastosowania do *półprzewodników magnetycznych*.

9. ? **Otwarty problem?** Uwaga świeża⁵: CZY TW. M-W ZACHODZI TEŻ W WYMIARZE 3? – Uwaga (pytanie) jest w (pozornej?) sprzeczności z faktem, że tw. Mermin-Wagnera zachodzi dla wymiarów 1 i 2, a dla 3 już nie. Natomiast, gdy *nie jest* spełnione któreś z założeń, to tw. M-W *może* nie zachodzić (np. jedna z uwag wyżej, że jeśli oddz. są dalekozasięgowe, to LRO może też pojawić się w $d = 2$.)

KONKRETNIE: Jednym z założeń w tw. M-W jest asymptotyka niskopędowa transformaty Fouriera (proporcjonalna do \mathbf{k}^2). W *niektórych* układach (tzw. sfrustrowanych) ta asymptotyka może być bardziej 'płaska', np. postaci \mathbf{k}^4 . Wtedy całka (111) byłaby rozbieżna w $d = 3$. Temat wydaje się wart zbadania. (po krokach wstępnych, tzn. najspierw: prześledzeniu literatury, a potem ponownym prześledzeniu dowodu).

ODP. Okazuje się, że bezpośredni analog argumentacji *nie idzie* dla $d = 3$ i stałych sprzężenia dających niestandardową asymptotykę. (Zauważył to Marcin Napiórkowski). Istnieją argumenty za tym, że dla asymptotyki niestandardowej (tzn. postaci $E(\mathbf{k}) \sim \mathbf{k}^4$) *nie ma* uporządkowania FM w dowolnie niskiej temperaturze (p. np. Simon, str. ok. 300), ale – na ile wykładowca wie – jest to (w dalszym ciągu) otwarty problem.

⁵Wykładowca w tym momencie (16.04.11) nie wie, czy nie okaże się to uwagą *drugiej* świeżości, podobnie jak jesiort w 'Mistrzu i Małgorzacie'. Tu 'druga świeżość' miałyby miejsce, gdyby ktoś kiedyś gdzieś takie. jak wyżej, układy już rozważał.

9 HuM & KK

Tu będzie krótkie (?; konkretnie: ok. półgodzinne) wprowadzenie motywacyjne do modelu Hubbarda, przytoczone za artykułem wykładowcy w 'Posępach Fizyki'.

9.1 Wstęp: Co to jest model Hubbarda?

Na to pytanie można najkrócej odpowiedzieć: Jest to jeden z najprostszych sieciowych modeli silnie skorelowanych elektronów. Potrzeba jego wykorzystania pojawia się tam, gdzie zawodzi opis przy użyciu przybliżenia elektronów niezależnych. Przybliżenie to uwzględnia oddziaływanie elektronów w sposób samouzgodniony (analogicznie jak przybliżenie Hartree-Focka w fizyce atomowej lub cząsteczkowej). Do opisu wielu zjawisk taki model wystarcza. Istnieją jednak problemy, w których elektronów nie można traktować jako cząstek niezależnych – należy do nich np. ferromagnetyzm metali, spora część układów wykazujących przejście metal-izolator. Układy, do opisu których nie wystarcza model cząstek niezależnych są to tzw. układy *silnie skorelowanych* elektronów.

Hamiltonian modelu Hubbarda zawiera jedynie dwa wyrazy:

$$H_{\Lambda} = T_{\Lambda} + V_{\Lambda}, \quad (112)$$

$$T_{\Lambda} = -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle; \sigma} c_{\mathbf{i}; \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{j}; \sigma} + c_{\mathbf{j}; \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{i}; \sigma} \quad (113)$$

$$V_{\Lambda} = U \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} n_{\mathbf{i}; +} n_{\mathbf{i}; -}, \quad (114)$$

gdzie: $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, $\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \Lambda$, $c_{\mathbf{i}; \sigma}^{\dagger}, c_{\mathbf{i}; \sigma}$ – operatory kreacji i anihilacji dla fermionów o spinie σ na węźle \mathbf{i} , zaś $n_{\mathbf{i}; \sigma} = c_{\mathbf{i}; \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{i}; \sigma}$ jest operatorem liczby cząstek.

Reguły komutacji/antykomutacji dla bozonów/fermionów

Model Hubbarda można uważać za “elementarny” – trudno wyobrazić sobie model bardziej uproszczony, a jednocześnie zawierający najważniejsze składniki obrazu fizycznego. Sytuację tę dobrze charakteryzuje powiedzenie A. Einsteina: *Wszystko powinno być tak proste, jak to tylko możliwe – ale nie prostsze*”. Jak wspomnieliśmy, model Hubbarda jest jednym z *najprostszych* modeli opisujących układ oddziaływujących elektronów wędrownych (itinerant) w kryształach (modelowanym przez potencjał periodyczny). Interpretacja członów powyżej jest następująca: T_{Λ} to *operator energii kinetycznej*, opisujący ruch cząstek swobodnych po sieci krystalicznej, zaś V_{Λ} jest *operatorem energii oddziaływania tych cząstek*, mającym chyba najprostszą możliwą postać: cząstki się odpychają, gdy znajdują się na jednym węźle, oraz nie oddziałują, gdy są na różnych węzłach. Taką postać oddziaływania można uważać za skrajnie uproszczony opis ekranowanego oddziaływania kulombowskiego.

Tak otrzymany hamiltonian jest drastycznie zredukowany w porównaniu z rzeczywistością i w związku z tym na ogół nie oczekuje się, że model Hubbarda będzie dawał ilościowy opis faktów eksperymentalnych: przy wyprowadzaniu z równania Schrödingera czyni się zbyt wiele upraszczających założeń. Uzasadnione są jednak nadzieje, że badanie modelu Hubbarda przyniesie chociaż jakościowe zrozumienie wielu zjawisk z zakresu fizyki silnie skorelowanych elektronów.

9.2 Od równania Schrödingera do modelu Hubbarda

Opiszemy tu najważniejsze kroki przy wyprowadzaniu hamiltonianu modelu Hubbarda z równania Schrödingera.

Model Hubbarda nie jest modelem fundamentalnym – przynajmniej w tym sensie, w jakim można uważać za fundamentalne np. równanie Schrödingera albo Diraca: Równania te *odgaduje się* albo *postuluje*, natomiast model Hubbarda się *wyprowadza*. Wyprowadzenie modelu Hubbarda z równania Schrödingera następuje przez szereg założeń, etapów pośrednich i przybliżeń, z których najważniejsze to: założenie o istnieniu periodycznej struktury krystalicznej; przybliżenie ciasnego wiązania; pominięcie całego szeregu całek w przybliżeniu ciasnego wiązania. (Tę drogę postępowania naszkicujemy w następnej części).

Ogólna postać hamiltonianu elektronowego \hat{H} dla elektronów w kryształach jest w formalizmie drugiej kwantyzacji następująca:

$$\hat{H} = \sum_{ij;\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \sum_{ijkl;\sigma,\sigma'} \langle ij | \frac{1}{r} | kl \rangle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{l,\sigma'} c_{k,\sigma} \quad (115)$$

gdzie $c_{i,\sigma}^\dagger$ ($c_{i,\sigma}$) jest operatorem kreacji (anihilacji) elektronu o spinie σ na orbitalu Wanniera zlokalizowanym na węźle i ; T_{ij} jest całką nakładania pomiędzy orbitalami i można ją interpretować jako macierz stałych przeskoku (“*hoppingu*”) elektronu pomiędzy węzłami i oraz j , zaś $\langle ij | \frac{1}{r} | kl \rangle$ jest elementem macierzowym oddziaływania kulombowskiego w bazie funkcji Wanniera na węzłach: i, j, k, l . Dla układów o wąskim paśmie (narrow-band systems) najistotniejsze elementy macierzowe to:

$$U \equiv \langle ii | \frac{1}{r} | ii \rangle, \quad (116)$$

$$V \equiv \langle ij | \frac{1}{r} | ij \rangle, \quad i, j \text{ są najbliższymi sąsiadami} \quad (117)$$

$$X \equiv \langle ii | \frac{1}{r} | ij \rangle, \quad i, j \text{ są najbliższymi sąsiadami} \quad (118)$$

Wielkości te są zwykle nazywane następująco: U – oddziaływanie kulombowskie na węźle (*on-site interaction*); V – oddziaływanie kulombowskie pomiędzy najbliższymi sąsiadami (*nearest-neighbour density interaction*); X – skorelowany hopping (*correlated hopping* lub *bond-charge interaction*).

Model został wprowadzony przez J. Hubbarda w r. 1963 [?] (niezależnie uczynili to Gutzwiller [?] i Kanamori [?]). Pierwotną motywacją wprowadzenia tegoż modelu był opis ferromagnetyzmu metalicznego (“*itinerant*”). Te wczesne próby nie zakończyły się powodzeniem – ówczesne dostępne metody analizy hamiltonianów takich jak (112) były mało skuteczne.

Później dostrzeżono, że model Hubbarda jest naturalnym ‘środowiskiem’ do badania innych zjawisk, takich jak:

- inne uporządkowania magnetyczne (antyferromagnetyzm, ferrimagnetyzm, metamagnetyzm ...)
- przejścia metal-izolator (Metal-Insulator Transition)
- nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe

- kondensacja Bosego-Einsteina zimnych atomów na 'sieci optycznej' (tu cząstki – atomy w pułapce magnetycznej – nie są fermionami a bozonami).

Wierzy się, że w ramach modelu Hubbarda można wyjaśnić te zjawiska, że model Hubbarda jest najprostszym modelem, w ramach którego możemy stojącą za nimi fizykę zrozumieć bez “wkładania rękami” tych efektów w hamiltonian. (W wielu przypadkach nadzieje te już się potwierdziły). Rola modelu Hubbarda jest więc dla teorii silnie skorelowanych elektronów równie fundamentalna, jak modelu Isinga dla teorii przejść fazowych: Oba modele stanowią “archetypy”, “paradygmaty” dla odpowiednich dziedzin.

Ta prostota modelu jest jednak złudna: dotyczy ona jedynie *sformułowania*, nie zaś *własności*. Model Hubbarda jest bardzo trudny do badania (“notoriously difficult”, jak to ujął E. Lieb.

Aby zorientować się w pochodzeniu trudności w badaniu modelu, spójrzmy na jego hamiltonian (113), (114). Dwa jego człony zachowują się *przeciwstawnie*. Dokładniej, funkcjami własnymi członu kinetycznego (113) są fale płaskie zdelokalizowane w całym dostępnym obszarze. Natomiast funkcjami własnymi członu potencjalnego (114) są cząstki zlokalizowane. To właśnie współzawodnictwo pomiędzy tymi dwoma przeciwnymi tendencjami (lokalizacja/delokalizacja) jest odpowiedzialne za bardzo różnorodne i często przeciwstawne zachowania w różnych obszarach przestrzeni parametrów.

? Przykład antyferromagnetyka i paramagnetyka, oraz ferromagnetyka?

9.3 Niektóre obserwable w modelu Hubbarda

Consider the *Hubbard model*, defined on the finite set of sites $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ by the Hamiltonian

$$H = - \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}; \sigma} t_{\mathbf{i}\mathbf{j}} (c_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}, \sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}, +} n_{\mathbf{i}, -} - \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \mu_{\mathbf{i}, \sigma} n_{\mathbf{i}, \sigma} \quad (119)$$

where: $\mathbf{i}, \mathbf{j} \in \Lambda$ are site indices; $c_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger (c_{\mathbf{i}, \sigma})$ are the spin one-half fermion creation (annihilation) on the \mathbf{i} -th site; $n_{\mathbf{i}, \sigma} = c_{\mathbf{i}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{i}, \sigma}$ are particle number operators and $\mu_{\mathbf{i}, \sigma}$ are chemical potentials for particles with spin σ .

We are working in the *grand canonical ensemble*, i.e. Ξ – grand canonical partition function:

$$\Xi = \text{Tr} e^{-\beta H},$$

and the average of the observable A is

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\Xi} \text{Tr} (A e^{-\beta H})$$

The trace is taken over the whole Fock space of electrons on the lattice Λ .

We will have to do with the following observables in the Hubbard model:

- **Spin operators:**

$$S_{\mathbf{i}}^\alpha = \sum_{\eta, \eta'} \sigma_{\eta, \eta'}^\alpha c_{\mathbf{i}, \eta}^\dagger c_{\mathbf{i}, \eta'}$$

Here: \mathbf{i} – site index; α – index of spin component (i.e. $\alpha = x, y, z$); $\sigma_{\eta, \eta'}^\alpha$ is α -th Pauli matrix. For instance:

$$S_{\mathbf{i}}^z = (n_{\mathbf{i}, +} - n_{\mathbf{i}, -})/2.$$

These operators fulfill ordinary *commutation* rules for one-half spin operators. Sometimes it is more convenient to introduce certain linear combinations of $S_{\mathbf{i}}^x$ and $S_{\mathbf{i}}^y$ operators:

$$S_{\mathbf{i}}^+ = c_{\mathbf{i}, +}^\dagger c_{\mathbf{i}, -}; \quad S_{\mathbf{i}}^- = c_{\mathbf{i}, -}^\dagger c_{\mathbf{i}, +}. \quad (120)$$

- The **density** (charge) operator:

$$n_{\mathbf{i}} = n_{\mathbf{i},+} + n_{\mathbf{i},-}$$

- The **on-site pairing** operator:

$$p_{\mathbf{i}} = c_{\mathbf{i},+}^{\dagger} c_{\mathbf{i},-}^{\dagger}; \quad p_{\mathbf{i}}^{\dagger} = c_{\mathbf{i},-} c_{\mathbf{i},+}$$

The **spin susceptibility** of the wave vector \mathbf{q} :

$$\chi_{\mathbf{q}} = \beta(S_{\mathbf{q}}^z, S_{-\mathbf{q}}^z) \quad (121)$$

where:

$$S_{\mathbf{q}}^z = \Lambda^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{i} \in \Lambda} S_{\mathbf{i}}^z e^{-i\mathbf{i} \cdot \mathbf{q}},$$

and (A, B) denotes the *two-point Duhamel function* (DTP):

$$(A, B) = \frac{1}{\Xi} \int_0^1 dx \text{Tr} \left[e^{-\beta x H} A e^{-(1-x)\beta H} B \right]$$

where A, B are arbitrary operators.

9.4 Jakie pytania stawiamy i co przypuszczamy

Parametry: t/U , β , ρ_+ , ρ_- (ew. μ_+ , μ_-)

1. Istnienie AF dla half-filling, dla sieci dwudzielnych, w $T > 0$ dla $d \geq 3$ N
2. Przejście metal-izolator przy zmianie filling'u i t/U N
3. Ferromagnetyzm (w modelach wielopasmowych i/lub na sieciach sfrustrowanych) Istnieją ścisłe wyniki dotyczące ferromagnetyzmu w modelach o bardzo 'płaskiej' dyspersji (tzn. $E(\mathbf{k})$).
4. Obecność fazy nadprzewodzącej

9.5 Tw. Kubo - Kishi 1 i 2 i co z nich wynika

Kubo and Kishi have proved the following theorems.

Theorem KK 1. [?] Assume that $U < 0$ and $\mu_{\mathbf{i},+} = \mu_{\mathbf{i},-} = \mu_{\mathbf{i}}$ (i.e. the magnetic field is equal to zero). Then the spin susceptibility is bounded from above by:

$$\chi_{\mathbf{q}} \leq \frac{1}{4|U|} \quad (122)$$

Remarks.

1. In the theory of phase transitions, an appearance of ordering is accompanied by the divergence of the corresponding susceptibility. So one can expect that the boundedness of the susceptibility (122) implies absence of the phase transition leading to magnetic ordering. It is the case – a sketch of proof of this fact is given at the end of this section.

2. This result is consistent with the physical intuition: The case $U < 0$ corresponds to the *attraction* between electrons with opposite spins. They are expected to form the gas of spinless bosons (at least at low temperatures) , for which the *magnetic* ordering is hardly expected.

Kubo and Kishi have proved also theorem for the *repulsive* HuM on the bipartite lattices. In this theorem, the upper bounds for charge and 'pairing' susceptibilities are obtained.

Theorem KK 2. [?] Assume that $U > 0$ and

$$\mu_+ + \mu_- = U. \quad (123)$$

Moreover, assume that the lattice is bipartite and $t_{ij} \neq 0$ only for pairs of \mathbf{i} and \mathbf{j} belonging to different sublattices A, B (i.e. for $\mathbf{i} \in A, \mathbf{j} \in B$). Then the charge and the on-site pairing susceptibilities satisfy the following inequalities:

$$\beta(\delta n_{\mathbf{q}}, \delta n_{-\mathbf{q}}) \leq \frac{1}{U} \quad (124)$$

and

$$\beta(p_{\mathbf{q}}, p_{-\mathbf{q}}^\dagger) \leq \frac{1}{U} \quad (125)$$

where $\delta n_{\mathbf{q}} = n_{\mathbf{q}} - \langle n_{\mathbf{q}} \rangle$ and $n_{\mathbf{q}}$ (resp. $p_{\mathbf{q}}$) is the Fourier transform of $n_{\mathbf{i}}$ (resp. $p_{\mathbf{i}}$) with the wave vector \mathbf{q} .

9.6 Aspekty techniczne I: DTF

Let us consider the quantum system in finite volume; let \mathcal{H} be the (finite-dimensional) Hilbert space of states of this system. The partition function Ξ for this system is $\Xi = \text{Tr}(e^{-\beta H})$. Let A, B – operators on \mathcal{H} . The *Duhamel two-point function* (DTF) is defined as [?]

$$(A, B) = \frac{1}{\Xi} \int_0^1 \text{Tr}(e^{-x\beta H} A e^{-(1-x)\beta H} B) dx \quad (126)$$

The Duhamel two-point function is closely related to susceptibilities in the system. It turns out that the expression

$$\frac{1}{2} \mu^2(A, A) \Xi$$

is the second order term in the perturbation expansion of the expression

$$\tilde{\Xi} = \text{Tr} e^{-\beta H + \mu A}$$

(i.e. the partition function of the system with the Hamiltonian H perturbed by the term $-\mu A/\beta$).

More generally, we have

$$(A, B) = \frac{1}{\Xi} \frac{\partial^2}{\partial \mu \partial \lambda} \text{Tr} [\exp(-\beta H + \mu A + \lambda B)] \quad (127)$$

The DTF possess the following properties (all of them are proved by simple calculation):

1. It is easy to check that (A, B) is *symmetric* in their arguments:

$$(A, B) = (B, A) \quad (128)$$

2. If A_r, A_i are self-adjoint operators and $A = A_r + iA_i$, then

$$(A^\dagger, A) = (A_r, A_r) + (A_i, A_i). \quad (129)$$

3. For H – self-adjoint operator on finite-dimensional space, let $\{\phi_i\}$ be its complete set of eigenvectors: $H\phi_i = \epsilon_i\phi_i$. Denoting:

$$a_{ij} = (\phi_i|A\phi_j), \quad b_{ij} = (\phi_i|B\phi_j)$$

(with $(\cdot|\cdot)$ being the scalar product in \mathcal{H}), we have following expressions for DTF:

$$(A, B) = \frac{1}{\Xi} \int_0^1 \sum_{i,j} a_{ij} b_{ji} e^{-(1-x)\beta\epsilon_j} dx \quad (130)$$

$$= \frac{1}{\beta\Xi} \sum_{i,j} a_{ij} b_{ji} \frac{e^{-\beta\epsilon_i} - e^{-\beta\epsilon_j}}{\epsilon_j - \epsilon_i} \quad (131)$$

4. One sees also that

$$(A^\dagger, A) \geq 0 \quad (132)$$

which imply the Schwarz inequality (using the symmetry property: $(A^\dagger, A) = (A, A^\dagger)$) on the set of operators on \mathcal{H} :

$$|(A, B)| \leq \sqrt{(A^\dagger, A)} \sqrt{(B^\dagger, B)}. \quad (133)$$

Wszystko ładnie! Ale trzeba by w końcu pokazać któryś z wzorów.

Przejścia pomiędzy wzorami (126), (130) i (131) są proste. Pokażemy wzór (131) przez bezpośrednie skalkulowanie⁶.

Na początek, aby zobaczyć zasadę rachunku, rozpatrzmy przypadek $A = B$:

$$\begin{aligned} \tilde{\Xi} &= \text{Tr}(e^{-\beta H + \lambda A}) \\ &= \text{Tr} \left[I + (-\beta H + \lambda A) + \frac{1}{2!}(-\beta H + \lambda A)^2 + \frac{1}{3!}(-\beta H + \lambda A)^3 + \dots + \frac{1}{k!}(-\beta H + \lambda A)^k + \dots \right] \end{aligned}$$

Rozwińmy wszystko i pozbierajmy człony przy poszczególnych potęgach λ ; aby za dużo nie przepisywać, oznaczmy: $h \equiv -\beta H$.

o) Jest chyba jasne, że przy zerowej potędze otrzymamy

$$\text{Coeff}(\lambda^0) = \exp(-\beta H) \equiv \Xi.$$

⁶Jest to przydługie i nudnawe; ale inne sposoby to byłaby zbyt długa dygresja. Ale gdyby ktoś chciał się z nimi zapoznać to ZACHECAM!!! Tematy związane bezpośrednio to: Wzór Bakera-Campbella-Hausdorffa; wzór Zassenhausa. Bezpośrednie zastosowania w fizyce to: Wzory na kolejne poprawki w rachunku zaburzeń; podatności (statyczne i dynamiczne) – tzn. drugie pochodne po parametrach) oraz wyższe pochodne.

•) Przy pierwszej potędze λ , mamy:

$$\text{Coeff}(\lambda^1) = A + \frac{1}{2!}(Ah + hA) + \frac{1}{3!}(Ahh + hAh + hhA) + \dots;$$

pamiętając, że pod śladem można cyklicznie przestawiać, otrzymamy, że ślad powyższego wyrażenia to

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[A + \frac{1}{2!}2(Ah) + \frac{1}{3!}3(Ahh) + \dots + \frac{1}{k!}k(Ah^{k-1}) + \dots \right] \\ &= \text{Tr} \left[A(I + h + \frac{1}{2!}h^2 + \dots + \frac{1}{(k-1)!}(h^{k-1}) + \dots, \right] \end{aligned}$$

czyli

$$\text{Coeff}(\lambda^1) = \text{Tr}[Ae^{-\beta H}] = \Xi\langle A \rangle.$$

••) Przy λ^2 , mamy:

$$\begin{aligned} \text{Coeff}(\lambda^2) &= \\ &= \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{3!}(AAh + AhA + hAA) \\ &+ \frac{1}{4!}(AAhh + AhAh + AhhA + hAAh + hAhA + hhAA) + \dots \\ &+ \frac{1}{k!} \text{wszystkie 'permutacje' } (k-2) \text{ egzemplarzy } h \text{ oraz } 2 \text{ egz. } A + \dots \end{aligned}$$

Uporządkujmy nieco wyraz k -tego rzędu. Wykorzystajmy tu znów możliwość cyklicznego przestawiania pod śladem. Mamy wtedy:

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[\frac{1}{k!} \text{wszystkie 'permutacje' } (k-2) \text{ egzemplarzy } h \text{ oraz } 2 \text{ egz. } A \right] \\ &= \frac{1}{k!} \frac{1}{2} \text{Tr} \left[(A^2h^{k-2} + \text{cykl.}) + (AhAh^{k-3} + \text{cykl.}) + \dots + (Ah^lAh^{k-l-2} + \text{cykl.}) + \dots \right] \\ &= \frac{1}{k!} \frac{1}{2} (k) \text{Tr} \left[A^2h^{k-2} + AhAh^{k-3} + \dots + Ah^lAh^{k-l-2} + \dots \right] \end{aligned}$$

Każdy taki ślad obliczmy, wstawiając dwie jedynki:

$$\begin{aligned} \text{Tr}[Ah^lAh^{k-l-2}] &= \sum_{i,j} (e_i, Ah^l e_j)(e_j, Ah^{k-l-2} e_i) = \sum_{i,j} (e_i, A e_j) E_j^l (e_j, A e_i) E_i^{k-l-2} \\ &= \sum_{i,j} a_{ij} a_{ji} E_j^l E_i^{k-l-2} \end{aligned}$$

(gdzie $E_i = -\beta \epsilon_i$). Mamy zatem:

$$\begin{aligned} \text{Coeff}(\lambda^2) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{ij} a_{ji} [1 + E_i + \frac{1}{3!}(E_i^2 + E_i E_j + E_j^2) + \dots] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{ij} a_{ji} [1 + \frac{1}{2}(E_i + E_j) + \frac{1}{3!}(E_i^2 + E_i E_j + E_j^2) + \dots] \end{aligned}$$

Przyjrzyjmy się teraz wzorowi (130). Rozwińmy exponensy w liczniku; mamy:

$$\begin{aligned} \frac{e^{E_j} - e^{E_i}}{E_j - E_i} &= 1 + \frac{1}{2} \frac{E_j^2 - E_i^2}{E_j - E_i} + \frac{1}{3!} \frac{E_j^3 - E_i^3}{E_j - E_i} + \dots \\ &= 1 + \frac{1}{2}(E_i + E_j) + \frac{1}{3!}(E_i^2 + E_i E_j + E_j^2) + \dots; \end{aligned}$$

widać więc, że dostaliśmy *to samo*. Tak więc pokazaliśmy wzór (130).

9.7 Aspekty techniczne II: lemat DLS

Theorem. Let \mathcal{H}_1 be the finite dimensional Hilbert space and $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$. Let A, B, \dots be operators defined on \mathcal{H}_1 . Denote:

$$A^+ = A \otimes \text{Id}, \quad B^+ = B \otimes \text{Id}, \dots \quad (134)$$

and

$$A^- = \text{Id} \otimes A, \quad B^- = \text{Id} \otimes B, \dots \quad (135)$$

Then for arbitrary self-adjoint operators in the real matrix representations A, B, C_1, \dots, C_l and arbitrary collection of real numbers h_1, \dots, h_l we have

$$\begin{aligned} & \left(\text{Tr} \left\{ \exp \left[A^+ + B^- - \sum_{i=1}^l (C_i^+ - C_i^- - h_i)^2 \right] \right\} \right)^2 \\ & \leq \left(\text{Tr} \left\{ \exp \left[A^+ + A^- - \sum_{i=1}^l (C_i^+ - C_i^-)^2 \right] \right\} \right) \\ & \cdot \left(\text{Tr} \left\{ \exp \left[B^+ + B^- - \sum_{i=1}^l (C_i^+ - C_i^-)^2 \right] \right\} \right) \end{aligned} \quad (136)$$

Remarks.

1. Our notation is slightly different from the notation in [?]: Our A^+, B^+, \dots is their A, B, \dots (*Warning:* the symbol: A has a double meaning in [?]: it denotes there both A as an operator acting in \mathcal{H}_1 as well as operator $A \otimes \text{Id}$. To make the notation more transparent, we denote their $A = A \otimes \text{Id}$ as A^+ etc., and our A^-, B^-, \dots are their $\tilde{A}, \tilde{B}, \dots$).
2. The minus sign at square terms containing C operators is crucial. Moreover, it is a trivial observation that one can replace any of square terms $-(C_i^+ - C_i^-)^2$ by $-\gamma_i(C_i^+ - C_i^-)^2$, where γ_i is a positive constant.

Dow. Niech α będzie pierwiastkiem lewej strony (tzn. najbardziej zewnętrznym nawiasem), czyli KONKRETNIE:

$$\alpha = \text{Tr} \left\{ \exp \left[A^+ + B^- - \sum_{i=1}^l (C_i^+ - C_i^- - h_i)^2 \right] \right\}$$

Mamy, z wzoru Liego-Trottera:

$$\alpha = \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_n,$$

gdzie

$$\alpha_n = \text{Tr} \left[\left\{ \exp \left(\frac{A^+}{n} \right) \cdot \exp \left(\frac{B^-}{n} \right) \prod_{i=1}^l \exp \left(\frac{(C_i^+ - C_i^- - h_i)^2}{n} \right) \right\}^n \right]$$

Dygresja: Wzór Liego-Trottera: Jeśli A, B – macierze kwadratowe, to

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{A}{n}} e^{\frac{B}{n}} \right)^n.$$

Wiele uogólnień na operatory.

Dowód, np. u Reeda i Simona I.

Koniec dygresji.

Ma miejsce następująca równość operatorowa (tu: macierzowa):

$$\exp(-A^2) = \frac{1}{4\pi} \int dk \exp(ikA - k^2/4).$$

Dow. – można rozwinąć obie strony w szereg w A i porównać, po wycalkowaniu prawej strony.

Wykorzystamy ją $n \times l$ razy, aby zlinearyzować wszystkie człony kwadratowe (zawierające operatory C_i). W ten sposób mamy:

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{1}{(4\pi)^{nl/2}} \int d^{nl}k \\ &\times \text{Tr} \left[\prod_{m=1}^n \left\{ \exp\left(\frac{A^+}{n}\right) \cdot \exp\left(\frac{B^-}{n}\right) \prod_{j=1}^l \exp\left(\frac{k_{m,j}(C_j^+ - C_j^-)}{\sqrt{n}}\right) \right\} \right] \\ &\times \exp(-k^2/4) \exp\left(-i \sum_{m=1}^n \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^l k_{m,j} h_j\right) \end{aligned} \quad (137)$$

Wtedy, każdy z (ślądów) iloczynów poniżej można przekształcać następująco:

$$\begin{aligned} &\text{Tr} \left[\exp\left(\frac{A^+}{n}\right) \exp\left(\frac{B^-}{n}\right) \exp\left(\frac{ik_{m,1}(C_1^+ - C_1^-)}{\sqrt{n}}\right) \exp\left(\frac{ik_{m,2}(C_2^+ - C_2^-)}{\sqrt{n}}\right) \dots \right] = \\ &\text{Tr} \left[\exp\left(\frac{A^+}{n}\right) \exp\left(\frac{ik_{m,1}C_1^+}{\sqrt{n}}\right) \exp\left(\frac{ik_{m,2}C_2^+}{\sqrt{n}}\right) \dots \overline{\exp\left(\frac{B^-}{n}\right) \exp\left(\frac{ik_{m,1}C_1^-}{\sqrt{n}}\right) \exp\left(\frac{ik_{m,2}C_2^-}{\sqrt{n}}\right) \dots} \right] \end{aligned} \quad (138)$$

Korzystaliśmy tu z założeń, że: $\bullet \dots^+$ oraz \dots^- są iloczynami tensorowymi z jedyką (w pierwszym lub drugim argumencie odpowiednio), więc są *przemienne* i można je przestawiać; oraz $\bullet \bullet$ wszystkie operatory A, B, C_i są *rzeczywiste samosprężone* (symetryczne), więc można brać ich sprzężenie zespolone *bez zmiany kolejności*.

Teraz: Wstawiamy rearrangement (138) do całki (137); wykorzystujemy nier. Schwarz'a do (137) – w ten sposób cudownie znikają exponensy zawierające $ik_{m,j}h_j$; i dalej: W pierwszej całce wykorzystujemy w odwrotną stronę równość (138), biorąc w pierwszej całce A zamiast B , a w drugiej na odwrót. W ten sposób dostajemy:

$$\begin{aligned} &|\alpha_n|^2 \leq \\ &\left(\frac{1}{(4\pi)^{nl/2}} \int d^{nl}k \text{Tr} \left[\exp\left(\frac{A^+}{n}\right) \exp\left(\frac{A^-}{n}\right) \times \exp[ik_{1,1}(C_1^+ - C_1^-)] \dots \exp(-k^2/4) \right] \right) \\ &\times \left(\frac{1}{(4\pi)^{nl/2}} \int d^{nl}k \text{Tr} \left[\exp\left(\frac{B^+}{n}\right) \exp\left(\frac{B^-}{n}\right) \times \exp[ik_{1,1}(C_1^+ - C_1^-)] \dots \exp(-k^2/4) \right] \right) \end{aligned}$$

Odwracając teraz kroki w dowodzie, dostajemy wzór (136).

CBDO

Special case: For $A = B$ we have

$$\begin{aligned} &\left(\text{Tr} \left\{ \exp \left[A^+ + A^- - \sum_{i=1}^l (C_i^+ - C_i^- - h_i)^2 \right] \right\} \right) \\ &\leq \left(\text{Tr} \left\{ \exp \left[A^+ + A^- - \sum_{i=1}^l (C_i^+ - C_i^-)^2 \right] \right\} \right) \end{aligned} \quad (139)$$

9.8 Dowód tw. KK 1 (wersja przyciągająca)

An idea of the proof is to write the Hamiltonian in such a form that the application of the DLS lemma is possible.

Let \mathcal{H}_1 be the Fock space for spin 'up' electrons. The Fock space of spin 'down' electrons is isomorphic to \mathcal{H}_1 , so we have $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1$.

Let us write the Hamiltonian (119) with the use of condition $\mu_+ = \mu_-$

$$H = T_+ + T_- - \mu \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+} - \mu \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},-} + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+} n_{\mathbf{i},-} \quad (140)$$

where

$$T_\sigma = - \sum_{\mathbf{ij};\sigma} t_{\mathbf{ij}} c_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j},\sigma}$$

Call this form (140) as I.

Write now the same Hamiltonian (119) in the form (called the form II)

$$H = T_+ + T_- - m \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+} - m \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},-} + a \sum_{\mathbf{i}} (n_{\mathbf{i},+} - n_{\mathbf{i},-})^2 \quad (141)$$

where

$$m = \mu - \frac{U}{2}, \quad a = -\frac{U}{2}$$

It is matter of simple recalculation to check that both expressions (140) and (141) define identical Hamiltonian; they are only different forms of it.

If we further denote

$$A^+ = -\beta(T_+ - m \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+}), \quad A^- = -\beta(T_- - m \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},-}),$$

$$C_{\mathbf{i}}^+ = n_{\mathbf{i},+}, \quad C_{\mathbf{i}}^- = n_{\mathbf{i},-}$$

then it is seen that the grand canonical partition function for the Hamiltonian (140) can be written as

$$\Xi = \text{Tr} \exp \left(A^+ + A^- + \frac{\beta U}{2} \sum_{\mathbf{i}} (n_{\mathbf{i},+} - n_{\mathbf{i},-})^2 \right);$$

it is clear that operators A^+ , A^- , $C_{\mathbf{i}}^+$ and $C_{\mathbf{i}}^-$ fulfill assumptions of the DLS lemma.

Observe further that if the coefficient $\frac{\beta U}{2}$ (standing before square terms) is negative, i.e. if

$$U < 0 \quad (142)$$

is fulfilled, then the DLS lemma implies that

$$\Xi(\{h_{\mathbf{i}}\}) \leq \Xi \quad (143)$$

for arbitrary collection $\{h_{\mathbf{i}}\}$ of reals. In expression above,

$$\Xi(\{h_{\mathbf{i}}\}) = \text{Tr} \exp \left(A^+ + A^- + \frac{\beta U}{2} \sum_{\mathbf{i}} (n_{\mathbf{i},+} - n_{\mathbf{i},-} - h_{\mathbf{i}})^2 \right).$$

Expand now the left-hand side of (143) in $\{h_{\mathbf{i}}\}$ up to second order. More precisely, replace $\{h_{\mathbf{i}}\}$ by $\lambda\{h_{\mathbf{i}}\}$, where λ is a parameter, and calculate the second derivative with respect to λ .

Using the properties of the DTP which are listed in the Appendix ??, one gets

$$-\beta U \sum_{\mathbf{i}} h_{\mathbf{i}}^2 + 4\beta^2 U^2 \left(\sum_{\mathbf{i}} S_{\mathbf{i}}^z h_{\mathbf{i}}, \sum_{\mathbf{i}} S_{\mathbf{i}}^z h_{\mathbf{i}} \right) \leq 0;$$

One can extend this inequality to $h_{\mathbf{i}}$ taking the *complex* values (see Appendix ??), and then after little rearrangement of terms we obtain

$$\left(\sum_{\mathbf{i}} S_{\mathbf{i}}^z h_{\mathbf{i}}^*, \sum_{\mathbf{i}} S_{\mathbf{i}}^z h_{\mathbf{i}} \right) \leq \frac{1}{4\beta U} \sum_{\mathbf{i}} |h_{\mathbf{i}}|^2 \quad (144)$$

If we take now

$$h_{\mathbf{i}} = \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}}, \quad (145)$$

then we obtain

$$(S_{-\mathbf{q}}^z, S_{\mathbf{q}}^z) \leq \frac{-1}{4\beta U}. \quad (146)$$

(remember that U has to be negative, so the sign of the right-hand side is positive). So, the inequality (122) has been proved.

9.9 Dowód tw. KK2 (wersja odpychająca)

The proof is based on the following unitary transformation, possible to perform on the bipartite lattice [?],[?], [?]. Assume then, that the lattice can be divided into two sublattices A and B . The transformation act as follows:

$$c_{\mathbf{i},-}^{\dagger} \rightarrow \eta_{\mathbf{i}} c_{\mathbf{i},-}; \quad c_{\mathbf{i},-} \rightarrow \eta_{\mathbf{i}} c_{\mathbf{i},-}^{\dagger} \quad (147)$$

where $\eta_{\mathbf{i}} = +1$ if $\mathbf{i} \in A$, $\eta_{\mathbf{i}} = -1$ if $\mathbf{i} \in B$. The operators $c_{\mathbf{i},+}^{\dagger}, c_{\mathbf{i},+}$ do not change under this transformation.

Upon the particle-hole transformation, the operators appearing in the Hamiltonian (119) change as follows:

1. the kinetic term $-\sum_{\mathbf{ij};\sigma} t_{\mathbf{ij}}(c_{\mathbf{i},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{j},\sigma} + \text{h.c.})$ does not change;
2. The interaction term changes as follows:

$$U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+} n_{\mathbf{i},-} \rightarrow U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+} (1 - n_{\mathbf{i},-}); \quad (148)$$

3. Chemical-potential terms change as:

$$\mu_{-} \sum_{\mathbf{i},-} n_{\mathbf{i},-} \rightarrow \mu_{-} \sum_{\mathbf{i},-} (1 - n_{\mathbf{i},-}), \quad (149)$$

and the term $\mu_{+} \sum_{\mathbf{i},+} n_{\mathbf{i},+}$ does not change.

4. The pairing and spin operators:

$$p_{\mathbf{i}} = c_{\mathbf{i},+}^{\dagger} c_{\mathbf{i},-}^{\dagger} \rightarrow 2S_{\mathbf{i}}^{+}, \quad p_{\mathbf{i}}^{\dagger} = c_{\mathbf{i},-} c_{\mathbf{i},+} \rightarrow 2S_{\mathbf{i}}^{-}, \quad (150)$$

and vice versa.

Summarizing, the transformed Hamiltonian \tilde{H} is:

$$\tilde{H} = T_+ + T_- - U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+} n_{\mathbf{i},-} + (U - \mu_+) \sum_{\mathbf{i},+} n_{\mathbf{i},+} + \mu_- \sum_{\mathbf{i},-} n_{\mathbf{i},-} - \mu_- |\Lambda|.$$

Then, it is seen that under this transformation, the attractive HuM ($U > 0$) has been transformed into the repulsive one ($U < 0$) and vice versa. Moreover, in the Hamiltonian also chemical potentials have undergone certain change.

Now, let us consider the Hamiltonian fulfilling assumptions of the KK 1 theorem, i.e. $\mu_+ = \mu_-$ and $U < 0$. Let us denote the Hamiltonian after transformation (147) as \tilde{H} . We have:

$$\tilde{H} = - \sum_{\mathbf{ij};\sigma} t_{\mathbf{ij}} (c_{\mathbf{i},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j},\sigma} + \text{h.c.}) + \tilde{U} \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+} n_{\mathbf{i},-} - \tilde{\mu}_+ \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},+} - \tilde{\mu}_- \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i},-}$$

where: $\tilde{U} = -U$, $\tilde{\mu}_+ = \mu_+$, $\tilde{\mu}_- = -\mu_- + U$ (so we have: $\tilde{\mu}_+ + \tilde{\mu}_- = U$).

Now, let us examine how changes the Duhamel function $(S_{\mathbf{q}}^z, S_{-\mathbf{q}}^z)$ under transformation (147). It is more convenient to consider the function $(S_{\mathbf{q}}^z, S_{-\mathbf{q}}^z) - \langle S_{\mathbf{q}}^z \rangle \langle S_{-\mathbf{q}}^z \rangle$. It turns out that this function transforms into $4(\delta n_{\mathbf{q}}, \delta n_{-\mathbf{q}})$.

Collecting together all facts above (i.e. the KK 1 theorem and the formula for the Hamiltonian after transformation, and moreover that $\langle S_{\mathbf{q}}^z \rangle = 0$ under assumptions of the KK 1 theorem), we obtain finally an inequality (124).

Now, let us remind that the Hamiltonian under consideration is *isotropic* one. For this reason, we have

$$(S_{\mathbf{q}}^z, S_{-\mathbf{q}}^z) = (S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-);$$

moreover, the Duhamel function $(S_{\mathbf{q}}^+, S_{-\mathbf{q}}^-)$ transforms into $4(p_{\mathbf{q}}, p_{-\mathbf{q}}^\dagger)$ under transformation (147). These facts imply an inequality (125).

Remark. The upper bound for the spin susceptibility implies also boundedness of two-point correlation function $\langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle$. This in turn implies absence of the magnetic long-range order. The argumentation goes as follows [?]. Using the Falk-Bruch inequality [?], [?] and estimation (122), one obtains the following upper bound for the two-point correlation function:

$$\langle S_{\mathbf{q}}^z S_{-\mathbf{q}}^z \rangle \leq \frac{1}{4} \sqrt{\frac{C_{\mathbf{q}}}{|U|}} \coth \left(\sqrt{\beta C_{\mathbf{q}} |U|} \right) \quad (151)$$

where $C_{\mathbf{q}}$ is any upper bound of the average of double commutator:

$$C_{\mathbf{q}} \geq \langle [S_{\mathbf{q}}^z, [H, S_{-\mathbf{q}}^z]] \rangle \quad (152)$$

(*Warning:* There is a misprint in the expression defining the quantity $C_{\mathbf{q}}$ in [?]). As an upper bound one can choose the function

$$C_{\mathbf{q}} = (2\sqrt{|\Lambda|})^{-1} \sum_{\mathbf{k}} |2E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}|,$$

where $E_{\mathbf{k}}$ are eigenvalues of the kinetic part of the Hubbard Hamiltonian, i.e. its Fourier transform:

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}} \sum_{\mathbf{j}} t_{\mathbf{ij}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{i}-\mathbf{j})}$$

(this estimation is reproduced in the Appendix ??, as only the final result has appeared in [?]). As a result, the two-point correlation function is bounded for $|\Lambda| \rightarrow \infty$ and there is no long-range magnetic order at any temperature.

Analogous argumentation can be applied to bound the charge and pairing correlation functions and to preclude corresponding orderings.

10 Odbiciowa dodatniość i dowód istnienia LRO w klasycznym modelu Heisenberga dla $d \geq 3$

Plan:

1. Uporządkowania (bądź ich brak) w różnych modelach,
2. Przeformułowania problemu istnienia LRO w niskich temperaturach,
3. Odbiciowa dodatniość (RP) i jej konsekwencje.
4. Dowód istnienia uporządkowań magnetycznych w niskich temperaturach dla modelu Heisenberga.

10.1 Wstęp

Subject: Klasyczne układy spinowe z ciągłą grupą symetrii

Układy spinowe z grupą symetrii:

- Dyskretną (np. model Isinga – grupa \mathbb{Z}^2)
- Ciągłą (np. model XY – spin przyjmuje wartości w S^1 ; model Heisenberga – spin przyjmuje wartości w S^2).

Układy o ciągłej grupie symetrii generalnie są trudniejsze do analizy niż te z grupą dyskretną.

- **Model Isinga:**

- ◇ Brak uporządkowania dla $T > 0$ w $d = 1$ ('20 – Ising);
- ◇ istnienie uporządkowania w niskich temperaturach w $d \geq 2$ (Peierls, '36 + Griffiths, '66)
- ◇ Modele o spinie dyskretnym, bez symetrii (Pirogov, Sinai '76)

- **Model XY oraz Heisenberga:**

- ◇ Brak uporządkowania dla $T > 0$ w $d = 1$ i 2 (Mermin, Wagner '66 – wersja kwantowa);
- ◇ istnienie uporządkowania w niskich temperaturach w $d \geq 3$ (Fröhlich, Simon, Spencer '76) – dowód oparty o własność *odbiciowej dodatniości* (*reflection positivity* – RP).

10.2 Praca FSS – zasadnicze elementy dowodu

1. Przejście do obrazu fal spinowych (transformata Fouriera)
2. Istnienie spontanicznej magnetyzacji równoważne makroskopowemu obsadzeniu modu o $\mathbf{q} = \mathbf{0}$.
3. To znaczy, że trzeba oszacować od góry wkład od pozostałych modów (o $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$).

4. FSS dowodzą, że energia każdego modu ograniczana jest przez wielkość z (klasycznej) zasady ekwipartycji;
5. a to wynika z dodatniości odpowiednio zdefiniowanej *podatności* (drugiej pochodnej po pewnym polu zewnętrznym),
6. a to się pokazuje poprzez *odbiciową dodatniość* – R.P..

Uwaga. Własności 3) – 5) prawdopodobnie zachodzą dla ogólnej klasy modeli. Niestety 5) udaje się udowodnić jedynie wychodząc od 6) – własność specyficzna i zależna od modelu – na szczęście dostatecznie ogólna.

10.3 Bardziej szczegółowo:

10.4 Definicje

Rozpatrujemy izotropowy model Heisenberga na zbiorze węzłów $\Lambda \subset \mathbb{Z}^3$. Na każdym węźle $\mathbf{x} \in \Lambda$ mamy spin $\mathbf{s}(\mathbf{x})$, przyjmujący wartości w jednostkowej sferze: $\mathbf{s}(\mathbf{x}) \in S^2$, $\|\mathbf{s}(\mathbf{x})\| = 1$.

Oddziaływania między spinami: $-J\mathbf{s}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{x}')$, $J > 0$ (przypadek ferromagnetyczny), \mathbf{x}, \mathbf{x}' – najbliżsi sąsiedzi.

Hamiltonian:

$$H_\Lambda = -J \sum_{i=1}^3 \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \mathbf{s}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \quad (153)$$

gdzie $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ – jednostkowe wektory sieci.

Zakładamy, że Λ jest *sześcianem*. Nakładamy *periodyczne warunki brzegowe*.

Hamiltonian (153) można równoważnie wyrazić w postaci (po dodaniu stałej)

$$H_\Lambda = \frac{1}{2} J \sum_{i=1}^3 \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} (\mathbf{s}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) - \mathbf{s}(\mathbf{x}))^2 \quad (154)$$

Liczenie średnich: Rozkład prawdopodobieństwa pojedynczego *swobodnego* spinu na sferze jest *izotropowy*, więc całkowanie po przestrzeni konfiguracyjnej pojedynczego spinu wykonuje się z wagą $d\omega(\mathbf{s})$ – unormowany element objętości na sferze jednostkowej ($d\omega(\mathbf{s}) = \frac{1}{4\pi} \sin \theta d\theta d\phi$).

Kanoniczna wartość średnia obserwabli A jest

$$\langle A \rangle_\Lambda = \frac{\langle A e^{-\beta H_\Lambda} \rangle_{0,\Lambda}}{\langle e^{-\beta H_\Lambda} \rangle_{0,\Lambda}}$$

gdzie

$$\langle f \rangle_{0,\Lambda} = \int f(\{\mathbf{s}(\mathbf{x})\}) \prod_{\mathbf{x} \in \Lambda} d\omega(\mathbf{s}_\mathbf{x}) \quad (155)$$

10.5 Uporządkowanie jako kondensacja fal spinowych

Dowód FSS polega na oszacowaniu dyspersji $m(\Lambda)$ magnetyzacji, tzn. wielkości:

$$m(\Lambda) = \frac{1}{|\Lambda|} \left\langle \left(\sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \mathbf{s}(\mathbf{x}) \right)^2 \right\rangle_\Lambda^{\frac{1}{2}} \quad (156)$$

Dygresja.

Wielkość $m(\Lambda)$ jest blisko związana ze *spontaniczną magnetyzacją* $m_0(\Lambda)$ przez *twierdzenie Griffithsa*:

Niech $\phi(h, \beta)$ będzie energią swobodną układu (tu: modelu Heisenberga). (h – pole magnetyczne).

Spontaniczne namagnesowanie definiuje się jako

$$m_0 = - \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\partial \phi(h, \beta)}{\partial h}. \quad (157)$$

Wtedy zachodzi nierówność:

$$m_0^2 \geq \lim_{\Lambda \nearrow \infty} \left\langle \left(\sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \mathbf{s}(\mathbf{x}) \right)^2 \right\rangle_{\Lambda} \quad (158)$$

Jeżeli więc udowodnimy *jednostajne* w Λ oszacowanie:

$$m(\Lambda) \geq C > 0,$$

to tym samym udowodnimy istnienie spontanicznej magnetyzacji.

Koniec dygresji.

10.6 Przejście do obrazu fal spinowych

Zapiszemy teraz równoważne wyrażenie na $m(\Lambda)$ w języku *fal spinowych*, tzn. w reprezentacji 'pędowej'.

Przejdźmy do transformaty Fouriera spinów $\mathbf{s}(\mathbf{x})$:

$$\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\Lambda} \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} \mathbf{s}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}, \quad (159)$$

\mathbf{q} przyjmuje wartości z pierwszej strefy Brillouina.

Z uwagi na: $\mathbf{s}(\mathbf{x})^2 = 1$ mamy

$$\sum_{\mathbf{q}} |\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})|^2 = |\Lambda|. \quad (160)$$

Wyrażmy hamiltonian (153) w języku $\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})$:

$$H(\Lambda) = \text{const.} + \sum_{\mathbf{q}} E(\mathbf{q}) |\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})|^2, \quad (161)$$

gdzie

$$E(\mathbf{q}) = J \sum_{i=1}^3 (1 - \cos q_i). \quad (162)$$

jest *energią fali spinowej o wektorze falowym* \mathbf{q} .

Wyrażmy teraz $m(\Lambda)$ w języku fal spinowych:

$$m(\Lambda)^2 = \frac{1}{|\Lambda|} \langle \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{0})^2 \rangle_{\Lambda} = 1 - \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \langle |\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})|^2 \rangle_{\Lambda} \quad (163)$$

Aby więc dostać to co chcemy, tzn. że granica $m(\Lambda)$ dla $\Lambda \rightarrow \infty$ jest niezerowa, wystarczy pokazać, że ostatni wyraz ma niezależną od Λ górną granicę $B < 1$, tj. że zachodzi

$$\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \langle |\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})|^2 \rangle_{\Lambda} < B < 1 \quad (164)$$

(przynajmniej dla dostatecznie dużych $|\Lambda|$).

Tu związek z BECon'em.

10.7 Oszacowanie podczerwone (infrared bound)

Będziemy więc udowadniaли 'nierówność kondensacyjną' (164).

FSS udowodnili to pokazując, że energia fali spinowej $E(\mathbf{q})\langle|\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})|^2\rangle_\Lambda$ dla $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ nie przewyższa wartości danej przez regułę ekwipartycji, tzn. $\frac{3}{2}kT$:

$$\langle|\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})|^2\rangle_\Lambda \leq \frac{1}{E(\mathbf{q})} \frac{3}{2}kT \quad (165)$$

Dlaczego (165) \implies (164)? Otóż jeśli spełniona jest nier. (165), to lewa strona (164) jest ograniczona z góry przez:

$$\frac{3}{2}kT \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{E(\mathbf{q})} \quad (166)$$

a ta suma może być z dowolną dokładnością aproksymowana (przybliżenie tym lepsze, im większe jest $|\Lambda|$) przez całkę:

$$\frac{3}{2}kT \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int_{[-\pi, \pi]^3} \frac{d^3\mathbf{q}}{E(\mathbf{q})}. \quad (167)$$

$E(\mathbf{q})$ jest ściśle dodatnie dla $\mathbf{q} > 0$, oraz ma asymptotykę w zerze:

$$E(\mathbf{q}) \approx \frac{1}{2}\mathbf{q}^2$$

dla małych \mathbf{q} , tak więc całka występująca w (166) jest zbieżna. Znaczy to, że L.H.S. nierówności (164) jest ograniczona przez $\text{const} \cdot T$ – jest więc mniejsza od 1 dla dostatecznie niskich temperatur.

1. Mamy stąd oszacowanie na temperaturę krytyczną T_c :

$$T_c \geq \left[\frac{3}{2}k \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int_{[-\pi, \pi]^3} \frac{d^3\mathbf{q}}{E(\mathbf{q})} \right]^{-1} \quad (168)$$

(dokładność kilkunastu %).

2. Oszacowanie na $\langle|\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})|^2\rangle_\Lambda$ dawane przez (165) jest zwykle nazywane *oszacowaniem podczerwonym (infrared bound)* – z uwagi na to, iż daje ono oszacowanie na $\langle|\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q})|^2\rangle_\Lambda$ dla małych \mathbf{q} .

Tak więc!! Dowód istnienia LRO w niskich temperaturach został sprowadzony do dowodu oszacowania (165).

10.8 Odpowiedź na zaburzenia – 'uogólniona podatność'

Z kolei, oszacowanie podczerwone można sformułować w języku 'odpowiedzi układu na odpowiednio zdefiniowane zewnętrzne zaburzenie'.

Konkretnie: Załóżmy, że każdy wyraz opisujący oddziaływanie pomiędzy najbliższymi sąsiadami:

$$\frac{1}{2}J(\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}'))^2$$

został zmieniony na

$$\frac{1}{2}J(\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}') - h(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))^2,$$

gdzie wyraz: $h \equiv \{h(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\}$ (spełniający: $h(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -h(\mathbf{x}', \mathbf{x})$) odpowiada zewnętrznemu polu na każdym 'wiązaniu' pomiędzy \mathbf{x} a \mathbf{x}' .

Hamiltonian układu zaburzonego można wtedy zapisać:

$$\begin{aligned} H(\Lambda, h) &= \frac{1}{2}J \sum_{i=1}^3 \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} (\mathbf{s}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) - \mathbf{s}(\mathbf{x}) - h(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i))^2 \\ &\equiv \frac{1}{2}J \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} (\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}') - h(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))^2 \end{aligned} \quad (169)$$

Energia swobodna układu zaburzonego jest:

$$F_\Lambda(h) = -kT \ln Z_\Lambda(h), \quad (170)$$

gdzie

$$Z_\Lambda(h) = \langle \exp(-\beta H(\Lambda, h)) \rangle_{0, \Lambda} \quad (171)$$

gdzie $\langle \dots \rangle_{0, \Lambda}$ jest zdefiniowana przez (155).

Teraz! Pokażemy, że problem dowodu oszacowania podczerwonego można zredukować do pokazania, że $F_\Lambda(h)$ osiąga *absolutne minimum* dla $h = 0$. Robimy to tak:

Ze wzorów: (155), (170) i (171) mamy:

$$F_\Lambda(h) = F_\Lambda(0) - kT \ln \langle \exp(\beta J \partial \mathbf{s}(h)) \rangle_\Lambda + \frac{1}{2}J|h|^2, \quad (172)$$

gdzie

$$\partial \mathbf{s}(h) = \sum_{i=1}^3 \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} (\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i)) \cdot h(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \quad (173)$$

oraz

$$|h|^2 = \sum_{i=1}^3 \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} |h(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{e}_i)|^2 \equiv \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} |h(\mathbf{x}, \mathbf{x}')|^2. \quad (174)$$

Przeliczenie wzoru (172): Mamy bowiem:

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(h) &= \langle \exp(-\beta H(\Lambda, h)) \rangle_{0, \Lambda} \\ &= \int \prod_{\mathbf{x} \in \Lambda} d\omega(\mathbf{s}_\mathbf{x}) \exp \left((-\beta) \frac{1}{2} J \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} (\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}') - h(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))^2 \right) \\ &= \int \prod_{\mathbf{x} \in \Lambda} d\omega(\mathbf{s}_\mathbf{x}) \exp \left(\frac{-\beta}{2} J \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} (\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}'))^2 + \beta J \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} (\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}')) h(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \right. \\ &\quad \left. - \frac{\beta}{2} J \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} |h(\mathbf{x}, \mathbf{x}')|^2 \right) \\ &= \left[\int \prod_{\mathbf{x} \in \Lambda} d\omega(\mathbf{s}_\mathbf{x}) \exp(-\beta H(\Lambda, 0)) \cdot \exp(\beta J \partial \mathbf{s}(h)) \right] \exp \left(-\frac{\beta}{2} J |h|^2 \right) \end{aligned}$$

$$= Z_\Lambda(0) \langle \exp(\beta J \partial \mathbf{s}(h)) \rangle_\Lambda \exp\left(-\frac{\beta}{2} J |h|^2\right);$$

stąd, po zlogarytmowaniu i pomnożeniu przez $(-\beta^{-1})$, dostajemy wzór (172).

Koniec przeliczenia (172)

Teraz: Jeśli $F_\Lambda(h)$ osiąga minimum w $h = 0$, to (dla ustalonego h) funkcja: $F_\Lambda(\lambda h)$ zmiennej rzeczywistej λ osiąga minimum dla $\lambda = 0$, czyli:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} F_\Lambda(\lambda h) \Big|_{\lambda=0} &= 0 \\ \frac{d^2}{d\lambda^2} F_\Lambda(\lambda h) \Big|_{\lambda=0} &\geq 0 \end{aligned}$$

lub, z równ. (172) – (174):

$$\langle \partial \mathbf{s}(h) \rangle_\Lambda = 0 \quad (175)$$

oraz

$$\beta J \langle |\partial \mathbf{s}(h)|^2 \rangle_\Lambda \leq |h|^2 \quad (176)$$

Przeliczamy znów:

Wyliczmy najspierw:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\lambda} \langle \exp(\beta J \partial \mathbf{s}(\lambda h)) \rangle \\ &= \frac{d}{d\lambda} \left[\int \prod_{\mathbf{x} \in \Lambda} d\omega(\mathbf{s}_{\mathbf{x}}) \exp(-\beta H(\Lambda, 0)) \cdot \exp(\lambda \beta J \partial \mathbf{s}(h)) \right] \Big|_{\lambda=0} \\ &= \left[\int \prod_{\mathbf{x} \in \Lambda} d\omega(\mathbf{s}_{\mathbf{x}}) \exp(-\beta H(\Lambda, 0)) \cdot \beta J \partial \mathbf{s}(h) \cdot \exp(\lambda \beta J \partial \mathbf{s}(h)) \right] \Big|_{\lambda=0} \\ &= \int \prod_{\mathbf{x} \in \Lambda} d\omega(\mathbf{s}_{\mathbf{x}}) \exp(-\beta H(\Lambda, 0)) \cdot \beta J \partial \mathbf{s}(h) \\ &= \beta J \langle \partial \mathbf{s}(h) \rangle_\Lambda; \end{aligned}$$

a stąd, patrząc na wzór (172) widzimy, że pochodna ostatniego członu się zeruje (bo jest proporcjonalny do λ^2) i dostaniemy

$$\frac{d}{d\lambda} F_\Lambda(\lambda h) \Big|_{\lambda=0} = -J \langle \partial \mathbf{s}(h) \rangle_\Lambda$$

i przyrównując to do zera, dostaniemy (175).

I dalej, analogicznie:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2}{d\lambda^2} F_\Lambda(\lambda h) \Big|_{\lambda=0} \\ & \frac{d^2}{d\lambda^2} \left[-\frac{1}{\beta} \ln \langle \exp(\beta J \partial \mathbf{s}(\lambda h)) \rangle_\Lambda + \frac{1}{2} J |\lambda h|^2 \right] \Big|_{\lambda=0} \\ & \frac{d}{d\lambda} \left[-J \langle \partial \mathbf{s}(h) \exp(\beta J \partial \mathbf{s}(\lambda h)) \rangle_\Lambda \frac{1}{\langle \exp(\beta J \partial \mathbf{s}(\lambda h)) \rangle_\Lambda} + \lambda J |h|^2 \right] \Big|_{\lambda=0} \\ &= -\beta J^2 \langle |\partial \mathbf{s}(h)|^2 \rangle_\Lambda + \beta J^2 \langle \partial \mathbf{s}(h) \rangle_\Lambda^2 + J |h|^2 \end{aligned}$$

i z warunku nieujemności tego wyrażenia, otrzymujemy (176).

Koniec przeliczenia

Równość (175) jest trywialna (niezmienniczość względem odbicia spinu). Warunek (176) trywialny nie jest. Można go rozszerzyć do zespolonego h : $h = h_R + ih_I$ (h_R, h_I są rzeczywiste).

Wybierzmy teraz:

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{|\Lambda|^{\frac{1}{2}}} (\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}) - \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'))u \quad \text{dla } \mathbf{q} \neq \mathbf{0},$$

gdzie u – dowolny wektor jednostkowy.

Wtedy!!! Nierówność (176) redukuje się do

$$\langle |\hat{\mathbf{s}}(\mathbf{q}) \cdot u|^2 \rangle \leq \frac{kT}{2E(\mathbf{q})} \quad \text{dla } \mathbf{q} \neq \mathbf{0}; \quad (177)$$

i oszacowanie podczerwone (165) wynika ze zsumowania nierówności (177), gdy brać kolejno $u = \mathbf{e}_x$, $u = \mathbf{e}_y$, $u = \mathbf{e}_z$.

Tak więc, jeśli F_Λ osiąga absolutne minimum dla $h = 0$, to jest spełniony warunek *dostateczny* na spełnienie oszacowania podczerwonego.

Konkluzja: Problem dowodu LRO w niskich temperaturach został zredukowany do pokazania, że $F_\Lambda(h)$ osiąga absolutne minimum dla $h = 0$.

Uwaga. Z definicji $F_\Lambda(h)$ wynika, że funkcja ta *osiąga* absolutne minimum, a nie tylko wartości dowolnie bliskie. (Argument: Funkcja ciągła na zbiorze zwartym osiąga swe kresy + zachowanie asymptotyczne $F_\Lambda(h)$ dla dużych h).

10.9 Odbiciowa dodatniość

Tu właśnie pojawia się odbiciowa dodatniość, jako sposób dowodu faktu, że $F_\Lambda(h)$ osiąga absolutne minimum dla $h = 0$.

Założmy, że mamy do czynienia z układem na sieci Λ , którą można podzielić na dwie części Λ_L i Λ_R , stanowiące swoje zwierciadlane odbicia w płaszczyźnie Π , która nie zawiera węzłów.

Przykł. Niech Λ – sześciian o boku zawierającym $2N$ węzłów, otwarte warunki brzegowe. Wtedy za Π można wziąć jedną z płaszczyzn $x_i = N + \frac{1}{2}$, $i = 1, 2, 3$. Wtedy Λ_L jest zbiorem węzłów o współrzędnych $x_i \leq N$, zaś Λ_R – węzłów o współrzędnych $x_i \geq N + 1$.

Przykł. Układ o okresowych warunkach brzegowych. Mamy tu $3N$ płaszczyzn odbić Π .

Jeśli x jest węzłem należącym do Λ_1 , to przez \bar{x} oznaczmy jego zwierciadlane odbicie w płaszczyźnie Π .

Niech $\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2$ tworzą *algebry* obserwabli na podukładach Λ_1, Λ_2 odpowiednio.

Zdefiniujmy operator $\theta : \mathcal{A}_1 \rightarrow \mathcal{A}_2$ jako:

$$\theta F(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}'), \dots, \mathbf{s}(\mathbf{x}^{(l)})) = \overline{F(\mathbf{s}(\bar{\mathbf{x}}), \mathbf{s}(\bar{\mathbf{x}}'), \dots, \mathbf{s}(\bar{\mathbf{x}}^{(l)}))} \quad (178)$$

gdzie $F \equiv F(\mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}'), \dots, \mathbf{s}(\mathbf{x}^{(l)})) \in \mathcal{A}_1$ jest obserwabłą na lewym podukładzie, tzn. jakąś funkcją spinów na Λ_1 .

Operator θ jest *antyliniowy*:

$$\theta(\lambda A + \mu B) = \bar{\lambda}\theta A + \bar{\mu}\theta B \quad (179)$$

dla $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ oraz $A, B \in \mathcal{A}_1$.

Z definicji (178) oraz własności (179) wynika, że

$$\langle A\theta A \rangle_{0,\Lambda} = |\langle A \rangle_{0,\Lambda}|^2 \quad \text{dla } A \in \mathcal{A}_1, \quad (180)$$

czyli dla dowolnego $A \in \mathcal{A}_1$ spełniony jest warunek **odbiciowej dodatniości** (RP):

$$\langle A\theta A \rangle_{0,\Lambda} \geq 0. \quad (181)$$

Uwaga. Z uwagi na to, że spełnione są warunki: (179) oraz (181), wielkość: $\langle A\theta B \rangle_{0,\Lambda}$ można uważać za *iloczyn skalarny* (na przestrzeni Hilberta obserwabli \mathcal{A}_1) i, w związku z tym, spełniona jest *nierówność Schwarz*:

$$|\langle A\theta B \rangle_{0,\Lambda}|^2 \leq \langle A\theta A \rangle_{0,\Lambda} \cdot \langle B\theta B \rangle_{0,\Lambda} \quad (182)$$

10.10 Kolejna nierówność dowodzona przez RP, a z której wynika LRO

Założmy, że na Λ mamy określone jakieś pole h (określone na bond'ach – jak zdefiniowane poprzednio). Zdefiniujmy pola h_1, h_2 na Λ następująco:

1.
 - Na zbiorze Λ_1 , pola h i h_1 pokrywają się: $h_1|_{\Lambda_1} = h|_{\Lambda_1}$; i analogicznie
 - Na zbiorze Λ_2 , pola h i h_2 pokrywają się: $h_2|_{\Lambda_2} = h|_{\Lambda_2}$
2. h_1, h_2 znikają na bond'ach łączących Λ_1 z Λ_2 ;
3. h_1, h_2 są niezmiennicze względem odbicia $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \rightarrow \bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{x}'}$, tzn.
 - $h_j(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = h(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ dla $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \Lambda_j, j = 1, 2$ (było w p. 1);
 - $h_j(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 0$ dla $\mathbf{x} \in \Lambda_1$ i $\mathbf{x}' \in \Lambda_2$, lub vice versa;
 - $h_j(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = h_j(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{x}'})$ dla $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \Lambda_1$.

Teraz sformułujmy rzeczoną nierówność. Otóż, pokażemy że:

$$Z_\Lambda(h) \leq \sqrt{Z_\Lambda(h_1) \cdot Z_\Lambda(h_2)} \quad (183)$$

gdzie $Z_\Lambda(h)$ była zdefiniowana przez (171), a pola h_1, h_2 powyżej. Dowód nierówności będzie wykorzystywał nierówność RP (182).

Uwaga. Zauważmy od razu, że nierówność (183) dla sum statystycznych jest równoważna nierówności dla energii swobodnych

$$F_\Lambda(h) \geq \frac{1}{2}(F_\Lambda(h_1) + F_\Lambda(h_2)). \quad (184)$$

Przed przystąpieniem do dowodu nierówności (184), poczynimy jeszcze jedną uwagę, że

Uwaga. Nierówność (184) jest kluczowa dla dowodu faktu, że

Stw. $F_\Lambda(h)$ osiąga minimum dla $h = 0$.

Dowód. Zakładamy periodyczne warunki brzegowe. Założmy, że F_Λ osiąga wartość minimalną $F_\Lambda^{(\min)}$ dla pola $h = \tilde{h}$. Wtedy, na mocy (184)

$$F_\Lambda^{(\min)} = F_\Lambda(\tilde{h}) \geq \frac{1}{2}(F_\Lambda(\tilde{h}_1) + F_\Lambda(\tilde{h}_2))$$

i, ponieważ ani $F_\Lambda(\tilde{h}_1)$ ani $F_\Lambda(\tilde{h}_2)$ nie mogą być mniejsze niż $F_\Lambda^{(\min)}$, wynika stąd, że

$$F_\Lambda(\tilde{h}_1) = F_\Lambda(\tilde{h}_2) = F_\Lambda^{(\min)}. \quad (185)$$

Teraz: Jeśli $\tilde{h} \neq 0$, to musi ono posiadać dodatnią liczbę niezerowych składowych (bond'ów) $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$: $\tilde{h}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \neq 0$. Niech l będzie liczbą bond'ów, na których \tilde{h} nie znika. W takim przypadku, możemy wybrać płaszczyznę Π , która przecina przynajmniej jeden 'bond' na którym \tilde{h} jest niezerowe. Niech wtedy l_1, l_2 będą liczbami wiązań, na których \tilde{h}_1 i odpowiednio \tilde{h}_2 nie znikają. Mamy więc:

$$l_1 + l_2 < 2l;$$

znaczy to, że przynajmniej jedna z liczb (l_1, l_2) jest mniejsza od l .

Stąd, na mocy (185): Jeśli F_Λ jest minimalizowane przez $h = \tilde{h}$, które posiada $l > 0$ niezerowych składowych, to F_Λ jest też minimalizowana przez inną wartość h , mianowicie przez \tilde{h}_1 lub \tilde{h}_2 , z których przynajmniej jedna posiada mniejszą od l liczbę niezerowych składowych.

Stąd, przez indukcję, wynika, że F_Λ jest minimalizowana przez $h = 0$ – co należało okazać.

Tak więc!!! Pozostaje teraz udowodnić nierówność (183).

10.11 Dowód nierówności (183) przy użyciu RP

RYS. Zapiszmy Hama układu na Λ w postaci:

$$H(\Lambda, h) = H(\Lambda_1, h_1) + H(\Lambda_2, h_2) + H_I(h), \quad (186)$$

gdzie

$$H(\Lambda_j, h_j) = \frac{1}{2}J \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \Lambda_j} (\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}') - h_j(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))^2 \quad (187)$$

są hamiltonianami podukładów na Λ_j ($j = 1, 2$) oraz

$$H_I(h) = \frac{1}{2}J \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_1, \mathbf{x}' \in \Lambda_2} (\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}') - h_j(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))^2 \quad (188)$$

jest Ham'em opisującym oddziaływanie pomiędzy układami na Λ_1 i Λ_2 .

Oddziaływanie to jest niezerowe jedynie na bond'ach przecinających Π , tzn. łączących płaszczyznę $\Pi_1 \subset \Lambda_1$, najbliższą równoległą do Π z odbiciem Π_1 w Π , tzn. płaszczyznę Π_2 . Możemy więc wyrażenie (188) napisać jako

$$H_I(h) = \frac{1}{2}J \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda_1} (\mathbf{s}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\bar{\mathbf{x}}) - h_j(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}}))^2 \quad (189)$$

lub skrótowo:

$$H_I(h) = \frac{1}{2}J(\mathbf{s} - \bar{\mathbf{s}} - h_I)^2 \quad \text{gdzie } \bar{\mathbf{s}} = \theta\mathbf{s}. \quad (190)$$

Teraz zapiszmy sumę statystyczną pełnego układu jako:

$$Z_\Lambda(h) = \langle \exp(-\beta H(\Lambda_1, h_1)) \exp(-\beta H_I(h)) \exp(-\beta H(\Lambda_2, h_2)) \rangle_{0, \Lambda}. \quad (191)$$

Teraz!!! **SZTUCZKA PROSTA A POŻYTECZNA:** Jak exponens kwadratu przekształcić w exponens wyrażenia liniowego?

Otóż za pomocą transformaty Fouriera gaussianu:

$$\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) = \text{const} \cdot \int d\mathbf{k} \exp\left(-\frac{k^2}{2\alpha} - i\mathbf{k}x\right)$$

Przy pomocy tej sztuczki zapiszemy wyraz z Ham'em oddziaływania jako:

$$\exp(-\beta H_I(h)) = C \int d\mathbf{K} \exp\left(-\frac{K^2}{2\beta J} - i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{s} - \bar{\mathbf{s}} - h_I)\right)$$

W ten sposób, suma statystyczna (191) przyjmuje postać

$$Z_{\Lambda}(h) = C \int dK \exp\left(-\frac{K^2}{2\beta J} + iK \cdot h_I\right) \times \langle \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_1)) \exp(iK \cdot \bar{\mathbf{s}} - \beta H(\Lambda_2, h_2)) \rangle_{0, \Lambda} \quad (192)$$

Z definicji operacji odbicia θ oraz jej własności, ostatni exponens w powyższym wzorze jest równy:

$$\theta \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_2))$$

i dlatego

$$Z_{\Lambda}(h) = C \int dK \exp\left(-\frac{K^2}{2\beta J} + iK \cdot h_I\right) \times \langle \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_1)) \theta \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_2)) \rangle_{0, \Lambda} \quad (193)$$

Teraz!!!! Z tej postaci $Z_{\Lambda}(h)$ i nierówności RP wynika, że

$$Z_{\Lambda}(h) \equiv |Z_{\Lambda}(h)| \leq C \int dK \exp\left(-\frac{K^2}{2\beta J}\right) \times \langle \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_1)) \theta \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_1)) \rangle_{0, \Lambda}^{\frac{1}{2}} \times \langle \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_2)) \theta \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_2)) \rangle_{0, \Lambda}^{\frac{1}{2}} \quad (194)$$

Teraz zaś zaaplikujemy do (194) *nierówność Schwarz*:

$$|\int fg dK| \leq \left(\int |f|^2 dK\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\int |g|^2 dK\right)^{\frac{1}{2}}$$

i dostaniemy:

$$Z_{\Lambda}(h) \leq \left[C \int dK \exp\left(-\frac{K^2}{2\beta J}\right) \times \langle \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_1)) \theta \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_1)) \rangle_{0, \Lambda} \right]^{\frac{1}{2}} \times \left[C \int dK \exp\left(-\frac{K^2}{2\beta J}\right) \times \langle \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_2)) \theta \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_2)) \rangle_{0, \Lambda} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (195)$$

Rozpoznamy teraz te wyrazy w nawiasach kwadratowych. Otóż jeśli weźmiemy wzór (193), i zastąpimy w nim h przez h_j ($j = 1, 2$), to z definicji h_1 i h_2 oraz h_I (początek cz. 3.7) widzimy, że h_1 , h_2 oraz h_I muszą być zastąpione przez h_j , h_j , 0 odpowiednio. Tak więc:

$$Z_{\Lambda}(h_j) = C \int dK \exp\left(-\frac{K^2}{2\beta J}\right) \times \langle \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_j)) \theta \exp(-iK \cdot \mathbf{s} - \beta H(\Lambda_1, h_j)) \rangle_{0, \Lambda}. \quad (196)$$

I TO JUŻ KONIEC!!!

Bo z dwóch powyższych równości (196) i (195) wynika, że

$$Z_{\Lambda}(h) \leq \sqrt{Z_{\Lambda}(h_1) \cdot Z_{\Lambda}(h_2)},$$

co jest ostatnim ogniwem, które trzeba było wykazać.

10.12 Podsumowanie

1. Dowód istnienia LRO – "konstruktywny", dający niezłe oszacowanie temp. krytycznej
2. Technika RP: bardzo "kapryśna", jeśli chodzi o jej stosowalność w zależności od parametrów (stałe sprzężenia lub tp.)
3. Technika RP udowodniono też istnienie p. fazowych typu 'displacive phase transitions' w kryształach anharmonicznych.
4. Istnieją uogólnienia na spinowe układy kwantowe w $d = 3$. Należą do nich układy z ciągłą grupą symetrii: model XY (FM i AFM), oraz *antyferromagnetyki*: model XXZ, w szczególności model Heisenberga (Dyson, Lieb, Simon '78; Fröhlich, Israel, Lieb, Spencer '80). Udowodniono LRO w dostatecznie niskich temperaturach dla spinu $S \geq 1$.

Otwarty problem: Czy istnieje LRO dla $S = \frac{1}{2}$, $d = 3$ AF Heisenberga w temperaturach dodatnich?

5. Technikami RP pokazano też istnienie LRO w stanach podstawowych układów *dwuwymiarowych* (XY – F oraz AF; izotropowy model Heisenberga dla $S \geq 1$) (Neves, Peres '86; Shastry, Lieb, Kennedy '88; Kubo, Kishi '88).

Otwarty problem: Czy istnieje LRO dla izotropowego $S = \frac{1}{2}$ AF Heisenberga?

6. Praca DLS dotyczy układów, gdzie przestrzeń Hilberta na węźle jest *skończeniowymiarowa*. Opracowano też wersję dla niektórych przypadków gdzie p. stanów jest nieskończenie wymiarowa (Pastur, Khoruzhenko) i zastosowano do przejść fazowych w kryształach anharmonicznych, oraz (oddziaływujących) kwantowych rotatorów. Tu jak zwykle $d = 3$. **Dość interesujący problem:** Adaptacja tego podejścia do $T = 0$, $d = 2$, i stanów podstawowych. Under development (WP, PStach, PM, JW).
7. Inna wersja RP: RP w przestrzeni *spinowej* dla modeli spinowych oraz elektronów wędrownych.
 - (a) Stany podstawowe szerokiej klasy modeli Hubbarda są *singletami* (Lieb '89) (np. modele dla $U < 0$).
 - (b) Wykluczenie szerokiej klasy przejść fazowych dla sfrustrowanych modeli spinowych (Lieb, Schupp 2000)
 - (c) Nierówności pomiędzy energiami stanów podstawowych dla modeli spinowych na różnych sieciach (Schupp 2000; JW 2005)
 - (d) Oszacowania z góry na podatność dla modeli Hubbarda z $U < 0$, dające *nieistnienie* uporządkowań spinowych (Kubo, Kishi '90; JW 2009).

11 Zadania egzaminacyjne

1. Wyprowadzić wzór na podatność magnetyczną w jednowymiarowym modelu Isinga w granicy TD. (tzn. przytoczyć wzór i zróżniczkować m po b – dopuszczalne jest różniczkowanie symboliczne). Zrobić wykres podatności jako funkcji od T dla $B = 0$. Zbadać, jak podatność zachowuje się w temperaturze bliskiej $T = 0$. To samo dla ciepła właściwego w $d = 1$ modelu Isinga – również dla $B = 0$. Obliczyć ciepło właściwe na jeden węzeł dla łańcuchów o okresowych warunkach brzegowych dla długości $N = 10, 20, 100$. Zrobić wykresy i porównać z wynikiem w granicy TD.
2. Znaleźć macierz przejścia oraz ciepło właściwe i podatność (w granicy TD) dla modelu Isinga o spinie 1. Sprawdzić, czy macierz przejścia ma pierwiastki wyliczalne bez wzorów Cardano, czy nie. Zależnie od zacięcia bardziej analitycznego lub numerycznego – obliczać pierwiastki jawnie i różniczkować analitycznie, lub wszystko robić numerycznie. (W razie potrzeby nie wahać się przed skorzystaniem z programów symbolicznych, pamiętając o ich możliwościach, ale i ograniczeniach). Sporządzić wykresy $c(T)$ i $\chi(T)$ przy $B = 0$. Zbadać, jak te wielkości zachowują się dla T bliskiej zeru. .
3. To samo dla drabinki Isinga.
4. Znaleźć macierz przejścia oraz ciepło właściwe i podatność dla sieci Isinga 4×4 . Sporządzić wykresy. *Wsk.* Napisać macierz przejścia i obliczyć ślad jej czwartej potęgi. Mocno sugerowane jest napisanie programiku symbolicznego do generowania macierzy przejścia (w MathematicaTM, MapleTM lub podobnym) i wygenerowanie i wymnożenie tamże, a następnie symboliczne zróżniczkowanie po parametrach. Ręczne sporządzanie takich rzeczy to praca dla osób, hmmm... z mocnym zacięciem do używania długopisu i papieru.
5. Rozwiązać model \mathbb{Z}_3 pola średniego, tzn. gdzie spiny oddziałują 'każdy z każdym' wg reguły $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, gdzie \mathbf{S}_i przyjmuje wartości: $(0, 1), (\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}), (-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$.
6. Rozwiązać model pola średniego dla spinu 1 a la Blume-Capel. Naszkicować diagram fazowy. Zbadać punkt trójkrytyczny i znaleźć tam wykładniki krytyczne.
7. Znaleźć wyrażenie na energię swobodną *anizotropowego* modelu Isinga na sieci kwadratowej, tzn. ze stałymi sprzężenia J_h (w kierunku poziomym) i J_v (w kierunku pionowym). (Wykorzystać całki grassmanowskie; odpowiedź podać w postaci analogicznej do wzoru (80)).
8. Znaleźć wyrażenie na energię swobodną anizotropowego modelu Isinga na sieci heksagonalnej. *Wsk.* Rozpatrzyć ogólniejszy model anizotropowy z czterema stałymi sprzężenia, równymi na plakietce o wierzchołkach w węzłach x, y, z, t : $J_{xy}, J_{yz}, J_{zt}, J_{tx}$ i przesuwanymi o wektory $(1, 1)$ i $(2, 0)$. Zobaczyć dla jakiego zestawu stałych otrzymuje się sieć heksagonalną. Wykorzystać całki grassmanowskie. Przy przejściu do zmiennych 'pędowych' zmodyfikować transformatę Fouriera tak, by uwzględnić okresowość o okresie 2.

Uwaga. Jako rozgrzewkę do zmodyfikowanej transformaty Fouriera, znaleźć wartości własne i wektory własne macierzy 'quasicyklicznej' ('o okresie 2'). Jako przykład takiej macierzy może służyć macierz m wymiaru parzystego $2n$, o dwóch parametrach

t oraz u , gdzie na diagonalu są na przemian zera oraz u , a elementy nediagonalne to: $m_{i,i+1} = m_{i,i-1} = t$ (oraz jeszcze $m_{1,2n} = m_{2n,1} = t$).

Egzamin pisemny polega na rozwiązaniu jednego z powyższych zadań w warunkach niekontrolowanej samodzielności. Rozwiązanie proszę dostarczyć wykładowcy w terminie do 06.06.2011, w formie pisemnej lub elektronicznej.

Wszystkie zadania mają tę samą wagę, z wyjątkiem zadań 6 i 8, wyraźnie (w ocenie wykładowcy) trudniejszych i bardziej pracochłonnych. Gdyby ktoś chciał wybrać te właśnie zadania, to w przypadku ich poprawnego rozwiązania i poprawnej odpowiedzi na egz. ustnym – może się spodziewać oceny 5+.

Literatura

- [1] B. Simon, *Mathematical Theory of Lattice Gases*, 1993 Ścisłe i jednocześnie nie nadmiernie sformalizowane ujęcie podstaw mechaniki statystycznej
- [2] G. Sewell Ścisłe i nie nadmiernie sformalizowane przedstawienie podstaw kwantowej mechaniki statystycznej; Reflection Positivity
- [3] D. C. Mattis, *Theory of Magnetism II Argument Peierlsa*; inne rozwiązanie modelu Isinga
- [4] R. J. Baxter, *Exactly solvable models of statistical mechanics*. 1-wymiarowy model Isinga; jak zdefiniować przejście fazowe
- [5] K. Huang, *Statistical mechanics*. Jak zdefiniować przejście fazowe
- [6] R. B. Griffiths, *Phys. Rev. A* **136**, 437 (1964) Argument Peierlsa.
- [7] D. Mermin, Wagner
- [8] S. Samuel, *J. Math. Phys.* **21**, 2806 (1980). Rozwiązanie modelu Isinga przy użyciu zmiennych Grassmanowskich
- [9] J. Feldman, H. Knörrer, E. Trubowitz: *Fermionic Functional Integrals and the Renormalization Group* We wstępie porządnym wykładem o całkach Grassmanowskich

Literatura uzupełniająca, luźniej związana z wykładem

1. Onsager; Kaufman; Kac, Ward; Vdovichenko; Landau, Lifszyc Różne sposoby rozwiązania dwuwymiarowego modelu Isinga
2. D. Ruelle, *Statistical Mechanics. Rigorous results* Ścisłe ujęcie podstaw mechaniki statystycznej i podstawowe wyniki