MŰEGYETEM 1782

TYPOTEX

TÓTH BÁLINT

A STATISZTIKUS FIZIKA MATEMATIKAI MÓDSZEREI

2011

Ismertető
Tartalomjegyzék
Pályázati támogatás
Gondozó
Szakmai vezető
Lektor
Technikai szerkesztő
Copyright

Ez a jegyzet egy PhD matematikus- és fizikushallgatóknak szóló speciálelőadás anyagát tartalmazza. Feltételezett előismeretek: bevezető analízis és valószínűségszámítás, valamint a statisztikus fizika alapjainak ismerete. A jegyzet az alábbi témaköröket öleli át:
A statisztikus fizika tárgya, A Curie–Weiss-modell, Ising-modell $\mathbf{Z}^d$-n; Termodinamikai limesz, Analitikusság, Fázisátmenet az Ising-modellben, A klasszikus Heisenberg modell, A kvantum Heisenberg modell.

Kulcsszavak: Curie–Weiss-modell, Ising-modell $\mathbf{Z}^d$-n; termodinamikai limesz, analitikusság, fázisátmenet az Ising-modellben, klasszikus Heisenberg modell, kvantum Heisenberg modell.

Támogatás:

Készült a TÁMOP-4.1.2-08/2/A/KMR-2009-0028 számú, a „Természettudományos (matematika és fizika) képzés a műszaki és informatikai felsőoktatásban” című projekt keretében.

Készült:

a BME TTK Matematika Intézet gondozásában

Szakmai felelős vezető:

Ferenczi Miklós

Lektorálta:

Krámli János

Az elektronikus kiadást előkészítette:

Vető Bálint

Címlap grafikai terve:

Csépány Gergely László, Tóth Norbert

ISBN: 978-963-279-459-4

Tartalomjegyzék

1. fejezet

Valószínűségszámítási bemelegítés

Független azonos eloszlású (i.i.d. = independent identically distributed) valószínűségi változókra vonatkozó határeloszlás-tételekkel fogunk foglalkozni. Célunk: (1) a valószínűségszámítási fogalmak és tények felfrissítése; (2) később belátni, hogy a statisztikus fizika érdekes jelenségei (pl. fázisátalakulások) éppen e „sima” valószínűségszámítási tényektől való *lényeges eltérésekben* nyilvánulnak meg.

Legyenek

$$\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots$$

i.i.d. valószínűségi változók, melyeknek (egyszerűség kedvéért) minden momentuma véges. Nyugodtan feltehetjük, hogy

$$\mathbf{E}\left(\xi\right) = 0$$

(egyébként tekintsük a $\tilde{\xi}_i = \xi_i - \mathbf{E}\left(\xi\right)$ valószínűségi változókat). Jelöljük

$$\sigma^2 := \mathbf{E}\left(\xi^2\right) < \infty$$

Érdekel: $\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n$ aszimptotikus eloszlása, minél pontosabban.

1.1. Nagy Számok Gyenge Törvénye

1. Tétel (NSZT)**.**

$$\mathbf{P}\left(\frac{|\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n|}{n} > \delta\right) \to 0$$

amint $n \to \infty$.

NSZT bizonyítása

2. Lemma (Markov-egyenlőtlenség)**.** *Legyen X nem-negatív valószínűségi változó és $\delta > 0$. Ekkor*

$$\mathbf{P}(X > \delta) \leq \frac{\mathbf{E}(X)}{\delta}. \tag{1.1}$$

Markov-egyenlőtlenség bizonyítása:

$$\mathbf{E}(X) \geq \mathbf{E}\left(X \mathbb{1}_{\{X>\delta\}}\right) \geq \delta \mathbf{P}(X > \delta).$$

□

Alkalmazzuk az (1.1) Markov-egyenlőtlenséget:

$$\mathbf{P}(|\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n| > n\delta) \leq \frac{\mathbf{E}\left((\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n)^2\right)}{n^2\delta^2} = \frac{\sigma^2}{n\delta^2} \to 0.$$

1.2. A karakterisztikus függvény

Legyen X tetszőleges valószínűségi változó. Karakterisztikus függvénye a következő:

$$g : \mathbb{R} \to \mathbb{C}, \qquad g(u) := \mathbf{E}(\exp\{iuX\}).$$

Azaz $g(\cdot)$ az X valószínűségi változó eloszlásfüggvényének a Fourier-Stieltjes transzformáltja.

A karakterisztikus függvény néhány alaptulajdonsága:

- Korlátos:
$$g(0) = 1 \quad \text{és} \quad \forall u \in \mathbb{R}: \quad |g(u)| \leq 1.$$

- Pozitív definit:
$$\forall u_1, u_2, \dots, u_k \in \mathbb{R}, \quad \forall z_1, z_2, \dots, z_k \in \mathbb{C}: \qquad \sum_{i,j=1}^{k} g(u_i - u_j) z_i \bar{z}_j \geq 0. \tag{1.2}$$

- Egyenletesen folytonos:
$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0: \qquad |u - v| < \delta \;\Rightarrow\; |g(u) - g(v)| < \varepsilon.$$

- Momentumok és a karakterisztikus függvény deriváltjai: Ha

$$\mathbf{E}\left(\left|X^k\right|\right) < \infty,$$

akkor a g karakterisztikus függvény n-szer folytonosan differenciálható és

$$g^{(k)}(0) = i^k \mathbf{E}\left(X^k\right), \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

Egyszerű bizonyítások és további fontos tulajdonságok: [26]. (De ki-ki maga is megpróbálhatja.)

Kérdés: Mely $\mathbb{R} \ni u \mapsto g(u) \in \mathbb{C}$ függvények lehetnek karakterisztikus függvények?

3. Tétel (Bochner-tétel)**.** *A $\mathbb{R} \ni u \mapsto g(u) \in \mathbb{C}$ függvény pontosan akkor karakterisztikus függvénye egy valószínűségi eloszlásfüggvénynek, ha $g(0) = 1$, $u = 0$-ban folytonos, és pozitív definit az (1.2) értelemben.*

Néhány nevezetes eloszlás és karakterisztikus függvényeik:

– $BER(p)$, Bernoulli-eloszlás. Paraméterei: $p, q \in [0, 1]$, $p + q = 1$.

$$\mathbf{P}(X = 1) = p, \quad \mathbf{P}(X = 0) = q; \qquad\qquad g(u) = q + pe^{iu},$$

vagy

$$\mathbf{P}(X = 1) = p, \quad \mathbf{P}(X = -1) = q; \qquad\qquad g(u) = \cos u + i(p - q)\sin u.$$

– $BIN(n, p)$, binomiális eloszlás. Paraméterei: $p, q \in [0, 1]$, $p + q = 1$,$n \in \mathbb{N}$.

$$\mathbf{P}(X = k) = \binom{n}{k} p^k q^{n-k}, \quad k = 0, 1, \ldots, n; \qquad\qquad g(u) = \left(q + pe^{iu}\right)^n.$$

– $POI(\mu)$, Poisson-eloszlás. Paraméterei: $\mu \geq 0$.

$$\mathbf{P}(X = k) = e^{-\mu}\frac{\mu^k}{k!}, \quad k0, 1, \ldots; \qquad\qquad g(u) = \exp\{\mu\left(e^{iu} - 1\right)\}.$$

– $UNI(a, b)$, egyenletes eloszlás. Paraméterei $-\infty < a < b < \infty$.

$$\mathbf{P}(X < x) = \frac{x - a}{b - a}, \quad a \leq x \leq b; \qquad\qquad g(u) = \frac{e^{iub} - e^{iua}}{iu(b - a)}.$$

– $EXP(\lambda)$, exponenciális eloszlás. Paraméterei: $\lambda > 0$.

$$\mathbf{P}(X < x) = 1 - e^{-\lambda x}, \quad 0 \leq x < \infty; \qquad g(u) = \frac{\lambda}{\lambda - iu}.$$

– $GAU(m, \sigma^2)$, Gauss vagy normális eloszlás. Paraméterei $m \in \mathbb{R}$, $\sigma > 0$.

$$\mathbf{P}(X < x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{(y-m)^2}{2\sigma^2}} dy; \qquad g(u) = \exp\{imu - \frac{\sigma^2 u^2}{2}\}$$

1. Házi feladat. Ellenőrizzük a fenti karakterisztikus függvények formuláit!

1.3. Centrális Határeloszlás Tétel

4. Tétel (CHT)**.**

$$\mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{\sqrt{n}} < x\right) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} dy.$$

CHT bizonyítása: Karakterisztikus függvények módszerével. Felhasználjuk a karakterisztikus függvényekre vonatkozó következő (igen fontos) tételt:

5. Tétel (Határeloszlás-tétel karakterisztikus függvények módszerével)**.** *Legyenek X_n, $n = 1, 2, \ldots$ és X valószínűségi változók. Eloszlásfüggvényeik*

$$F_n(x) := \mathbf{P}(X_n < x), \qquad F(x) := \mathbf{P}(X < x)$$

és karakterisztikus függvényeik

$$g_n(u) := \mathbf{E}(\exp\{iuX_n\}), \qquad g(u) := \mathbf{E}(\exp\{iuX\}).$$

A következő két állítás ekvivalens:

(1) Az $F(\cdot)$ eloszlásfüggvény folytonossági pontjaiban, x-ben pontonként

$$F_n(x) \to F(x).$$

(2) u-ban pontonként

$$g_n(u) \to g(u).$$

Bizonyítás. Pl. [26]. □

Alkalmazzuk a fenti tételt

$$X_n := \frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{\sqrt{n}}$$

valószínűségi változókra. Ekkor

$$\begin{aligned} g_n(u) &= \mathbf{E}\left(\exp\{iu\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{\sqrt{n}}\}\right) \\ &= \left(\mathbf{E}\left(\exp\{iu\xi_1/\sqrt{n}\}\right)\right)^n \\ &= (1 - u^2\sigma^2/(2n) + o(1/n))^n \\ &\to e^{-u^2\sigma^2/2}. \end{aligned}$$

□

1.4. Nagy Eltérés Tétel

Legyen ξ nem elfajult val. változó és

$$F(x) = \mathbf{P}(\xi < x)$$

az eloszlásfüggvénye. Értelmezzük a következő függvényeket:

$$\begin{aligned} &Z : \mathbb{R} \to (0, \infty], && Z(\lambda) := \mathbf{E}\left(e^{\lambda\xi}\right), \\ &\hat{I} : \mathbb{R} \to (\infty, \infty], && \hat{I}(\lambda) := \ln Z(\lambda) \end{aligned}$$

Legyenek

$$\underline{\lambda} := \inf\{\lambda \in \mathbb{R} : Z(\lambda) < \infty\}, \qquad \bar{\lambda} := \sup\{\lambda \in \mathbb{R} : Z(\lambda) < \infty\}.$$

Feltesszük, hogy

$$\underline{\lambda} < 0 < \bar{\lambda}.$$

Ez a feltevés a ξ valószínűségi változó momentumai növekedési sebességét korlátozza.

6. Állítás ($\hat{I}(\cdot)$ függvény tulajdonságai)**.** *: Az $\hat{I} : (\underline{\lambda}, \bar{\lambda}) \to (-\infty, \infty)$ függvény*

(1) végtelenszer differenciálható és

(2) szigorúan konvex.

Az Állítás bizonyítása: (1) Differenciálhatóság: ha $\underline{\lambda} < \lambda < \bar{\lambda}$, akkor minden $n \in \mathbb{N}$-re

$$Z^{(n)}(\lambda) = \mathbf{E}\left(\xi^n e^{\lambda\xi}\right) < \infty$$

amiből $\hat{I}(\cdot)$ differenciálhatósága is egyenesen adódik.

(2) Konvexitás:

$$\hat{I}'(\lambda) = \frac{\mathbf{E}\left(\xi e^{\lambda\xi}\right)}{\mathbf{E}\left(e^{\lambda\xi}\right)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} y e^{\lambda y} dF(y)}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{\lambda y} dF(y)} = \mathbf{E}\left(\xi^{(\lambda)}\right)$$

$$\begin{aligned}\hat{I}''(\lambda) &= \frac{\mathbf{E}\left(\xi^2 e^{\lambda\xi}\right)}{\mathbf{E}\left(e^{\lambda\xi}\right)} - \left(\frac{\mathbf{E}\left(\xi e^{\lambda\xi}\right)}{\mathbf{E}\left(e^{\lambda\xi}\right)}\right)^2 \\ &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} y^2 e^{\lambda y} dF(y)}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{\lambda y} dF(y)} - \left(\frac{\int_{-\infty}^{\infty} y e^{\lambda y} dF(y)}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{\lambda y} dF(y)}\right)^2 = \mathbf{Var}\left(\xi^{(\lambda)}\right) > 0,\end{aligned}$$

ahol $\xi^{(\lambda)}$

$$\mathbf{P}\left(\xi^{(\lambda)} < x\right) = F_\lambda(x) := \frac{\int_{-\infty}^{x} e^{\lambda y} dF(y)}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{\lambda y} dF(y)}$$

eloszlásfüggvényű valószínűségi változó.

□

1.5. Konvex konjugálás/Legendre-transzformáció

Legyen $I : \mathbb{R} \to [0, \infty]$ a következő képpen értelmezve:

$$I(x) := \sup_{\lambda \in \mathbb{R}} \left(\lambda x - \hat{I}(\lambda)\right). \tag{1.3}$$

Mivel

$$\lim_{\lambda \to -\infty} \hat{I}'(\lambda) = \inf\{x \in \operatorname{supp}(F)\} =: \underline{x}, \tag{1.4}$$

$$\lim_{\lambda \to \infty} \hat{I}'(\lambda) = \sup\{x \in \operatorname{supp}(F)\} =: \bar{x}, \tag{1.5}$$

ha $x \in (\underline{x}, \bar{x})$, akkor a

$$\hat{I}'(\lambda) = x \tag{1.6}$$

egyenletnek *létezik egyetlen* $\lambda^*(x) \in (\underline{\lambda}, \bar{\lambda})$ megoldása és

$$I(x) = x\lambda^*(x) - \hat{I}(\lambda^*(x)) \tag{1.7}$$

7. Állítás ($I(\cdot)$ függvény tulajdonságai:)**.** *Az* $I : (\underline{x}, \bar{x}) \to (0, \infty)$ *függvény*

(1) végtelenszer differenciálható,

(2) szigorúan konvex,

(3)

$$I(\mathbf{E}\,(\xi)) = 0, \tag{1.8}$$

(és természetesen $I(x) > 0$ *minden* $x \neq \mathbf{E}\,(\xi)$*-re).*

(4) $I(\cdot)$ *alulról félig folytonos, következésképp:*

$$I(\underline{x}) = \lim_{\varepsilon \to 0} I(\underline{x} + \varepsilon), \qquad I(\bar{x}) = \lim_{\varepsilon \to 0} I(\bar{x} - \varepsilon),$$

(5)

$$x \notin [\underline{x}, \bar{x}] - re: \quad I(x) = \infty.$$

Állítás bizonyítása: (1) Differenciálhatóság: $I(\cdot)$ differenciálhatósága egyenesen következik $\hat{I}(\cdot)$ differenciálhatóságából.

(2) Konvexitás: (3.4)–(1.7)-ből

$$I'(x) = \lambda^*(x) + \Big(x - \hat{I}'(\lambda^*(x))\Big)\,\lambda^{*\prime}(x) = \lambda^*(x).$$

Még egy differenciálás után, (3.4)-et újból felhasználva,

$$I''(x) = \lambda^{*\prime}(x) = \Big(\hat{I}''(\lambda^*(x))\Big)^{-1} > 0.$$

(3) Világos, hogy

$$\lambda^*(\mathbf{E}\,(\xi)) = 0$$

amiből, (1.7) útján (1.8) adódik.

(4) Az alulról félig folytonosság abból következik, hogy $I(\cdot)$ folytonos függvények családjának szuprémuma (def. alapján).

(5) A (1.3), (1.4) és (1.5)-ből következik.

$\square$

8. Tétel (NET, H. Cramér)**.** *Legyenek ξ_j i.i.d. valószínűségi változók, $F(\cdot)$ eloszlásfüggvénynyel és (a, b) valós intervallum. Ekkor*

$$-\frac{1}{n} \ln \mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{n} \in (a, b)\right) \to \inf_{a<x<b} I(x).$$

1. Megjegyzés. *Kevésbé precíz, de szemléletesebb megfogalmazásban:*

$$\mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{n} \approx x\right) = \exp\{-nI(x) + o(n)\}. \tag{1.9}$$

Cramér-tétel bizonyítása: Feltehetjük, hogy

$$m := \mathbf{E}(\xi) < a < b.$$

(1) *Felső becslés:* Legyen $\lambda > 0$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{n} \in (a, b)\right) &\le \mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{n} > a\right) \\ &< e^{-\lambda a n} \mathbf{E}\left(e^{\lambda \xi}\right)^n \\ &= \exp\{-n(\lambda a - \hat{I}(\lambda))\}. \end{aligned}$$

Markov-egyenlőtlenséget használtuk az $\exp\{\lambda(\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n)\}$ valószínűségi változóra, majd a $\hat{I}$ függvény értelmezését.

A fenti egyenlőtlenség minden $\lambda > 0$-ra igaz, következésképpen

$$\mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{n} \in (a, b)\right) \le \exp\{-n \sup_{\lambda>0}(\lambda a - \hat{I}(\lambda))\}.$$

Mivel $a > m$ esetén $\lambda^*(a) > 0$, azt kapjuk, hogy

$$\sup_{0<\lambda<\infty} (\lambda a - \hat{I}(\lambda)) = \sup_{-\infty<\lambda<\infty} (\lambda a - \hat{I}(\lambda)) = I(a),$$

és végül

$$\mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n}{n} \in (a, b)\right) \le \exp\{-nI(a)\}.$$

(2) *Alsó becslés:* Legyen $y \in (a,b) \cap (\underline{x}, \bar{x})$, $(y-\varepsilon, y+\varepsilon) \subset (a,b)$ és $\lambda^* := \lambda^*(y)$. Legyenek $\xi_1^*, \xi_2^*, \dots$

$$\mathbf{P}\left(\xi^* < x\right) = F^*(x) := \frac{\int_{-\infty}^{x} e^{\lambda^* z} dF(z)}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{\lambda^* z} dF(z)}$$

eloszlású i.i.d valószínűségi változók. Ha F_n-el, illetve F_n^*-el jelöljük a $\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n$, illetve $\xi_1^* + \xi_2^* + \dots + \xi_n^*$ valószínűségi változók eloszlásfüggvényeit,

$$F_n(x) := \mathbf{P}\left(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n < x\right),$$
$$F_n^*(x) := \mathbf{P}\left(\xi_1^* + \xi_2^* + \dots + \xi_n^* < x\right),$$

akkor

$$dF_n^*(x) = Z(\lambda^*)^{-n} e^{\lambda^* x} dF_n(x), \qquad dF_n(x) = Z(\lambda^*)^{n} e^{-\lambda^* x} dF_n^*(x).$$

Ezt használva a következő egyenlőtlenségsorozatot kapjuk:

$$\begin{aligned}
&\mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n}{n} \in (a,b)\right) \\
&\quad \geq \mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n}{n} \in (y-\varepsilon, y+\varepsilon)\right) \\
&\quad = \int_{n(y-\varepsilon)}^{n(y+\varepsilon)} dF_n(z) \\
&\quad = Z(\lambda^*)^n \int_{n(y-\varepsilon)}^{n(y+\varepsilon)} e^{-\lambda^* z} dF_n^*(z) \\
&\quad \geq \left(Z(\lambda^*) e^{-\lambda^*(y+\varepsilon)}\right)^n \int_{n(y-\varepsilon)}^{n(y+\varepsilon)} dF_n^*(z) \\
&\quad = e^{\{-n(I(y)+\varepsilon\lambda^*)\}} \mathbf{P}\left(\frac{\xi_1^* + \xi_2^* + \dots + \xi_n^*}{n} \in (a,b)\right).
\end{aligned}$$

Mivel, a NSzT alapján

$$\mathbf{P}\left(\frac{\xi_1^* + \xi_2^* + \dots + \xi_n^*}{n} \in (a,b)\right) \to 1,$$

következik, hogy

$$\liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln \mathbf{P}\left(\frac{\xi_1^* + \xi_2^* + \dots + \xi_n^*}{n} \in (a,b)\right) \geq - \inf_{a<y<b} I(y).$$

□

2. Házi feladat. Számoljuk ki az $\hat{I}(\lambda)$ és $I(x)$ függvényeket a $GAU(m, \sigma^2)$, $EXP(\mu)$, $BER(p)$, $BIN(n, p)$, $GEOM(p)$ és $POI(\lambda)$ eloszlásokra.

3. Házi feladat. Ugyanezen eloszlásokra „bizonyítsunk naivul”, azaz (1.9) alapján és a

$$n! = e^{-n} n^n \sqrt{2\pi n}\,(1 + o(1))$$

Stirling-formula segítségével nagy eltérés becslést.

A fejezethez kapcsolódó irodalom: [26], [3], [6], [18], [1], [31], [30].

2. fejezet

A statisztikus fizika tárgya; kanonikus eloszlás; Ising-modell

2.1. A statisztikus fizika tárgya

Sok azonos, egymással kölcsönható kis (elemi, atomi, ...) komponensből felépülő nagy rendszer globális viselkedésének leírása.

- *Sok*:

  1. limeszben végtelen sok: termodinamikai limesz, vagy
  2. eleve végtelen: végtelen rendszerek Gibbs-állapotai.

  Mi az első megközelítést fogjuk tekinteni.

- *Globális viselkedés*: Néhány, ún. intenzív paraméterrel jellemezhető (pl. hőmérséklet, nyomás, kémiai potenciál). További releváns mérhető mennyiségek: (extenzív) átlagok (pl. sűrűség, mágnesezettség).

- *Egyensúly*: Időtől független, statikus jellemzők.

- *Nemegyensúly*: Időbeli fejlődés, időfüggő jelenségek.

Már az egyensúly definíciója is gond. Kielégítő, de matematikailag szinte kezelhetetlen:

$$\text{tetszőleges nemegyensúly} \quad \frac{\text{dinamika}}{t \to \infty} \quad \text{egyensúly.}$$

2.2. A kanonikus eloszlás

- *Álapottér*:

$$\Omega := \{\text{a rendszer lehetséges állapotainak halmaza}\}.$$

  Egyelőre véges, később lesz lokálisan kompakt, metrikus is. Természetes Borel σ-algebrával.

- *Hamilton-függvény*:

$$H : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$$

  $H(\omega)$ az ω állapot energiája.

- *Kanonikus/Gibbs-eloszlás*:

$$d\mu(\omega) = \frac{1}{Z(\beta)} \exp\{-\beta H(\omega)\} d\nu(\omega). \tag{2.1}$$

  Ahol:

  - ν: a priori szabad mérték az állapottéren (természetes – pl. szimmetria – megfontolások alapján választjuk meg),
  - $\beta = 1/T > 0$: inverz hőmérséklet,
  - $\exp\{-\beta H(\omega)\}$: Boltzmann- (vagy Gibbs)-faktor, az ω állapot relatív súlya,
  - $Z(\beta)$: állapotösszeg, stat-szumma, partíciós függvény – szerepe: normáló tényező, hogy a μ *valószínűségi* mérték legyen.

- *Egyensúlyi statisztikus fizika*: fizikailag releváns változók (i.e. $f : \Omega \to \mathbb{R}$ függvények) μ szerinti eloszlását, statisztikai tulajdonságait vizsgáljuk.

Indoklás: Tekintsünk egy véges rendszert

$$\Omega = \{1, 2, \ldots, n\}$$

állapottérrel és ν a priori eloszlással (pl. egyenletes). Továbbá, N azonos előbbiből álló szuper-rendszert, aminek állapottere

$$\Omega^N := \{\underline{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_N) | \omega_k \in \Omega, \;\; k = 1, 2, \ldots, N\}.$$

Egyszerűség kedvéért egyelőre hanyagoljuk el a komponens rendszerek kölcsönhatási energiáját. Ekkor a szuper-rendszer teljes energiája

$$H_N(\underline{\omega}) = H(\omega_1) + H(\omega_2) + \cdots + H(\omega_N).$$

Legyen a szuper-rendszer (komponensenkénti átlag) energiája adott:

$$\frac{1}{N} H_N(\underline{\omega}) \in (\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$$

Kérdés: e feltétel mellett mi az ω_1 (vagy bármely ω_k) eloszlása?

Válasz: pontosan a (2.1)-beli μ, azzal a β-val, amely mellett

$$\langle H \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \int_\Omega H(\omega) e^{-\beta H(\omega)} d\nu(\omega) = \epsilon.$$

A valószínűségszámítási probléma: Legyenek $\xi_1, \xi_2, \ldots$ i.i.d. valószínűségi változók $F(x) = \mathbf{P}(\xi < x)$ közös eloszlásfüggvénnyel.

9. Állítás (Nagy eltérés következménye)**.**

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \lim_{N \to \infty} \mathbf{P}\left(\xi_1 \in (a, b) \mid \frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_N}{N} \in (x - \varepsilon, x + \varepsilon) \right) = \frac{1}{Z(\beta)} \int_a^b e^{-\beta y} dF(y),$$

ahol $\beta = \beta^*(x)$ az

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta y} y dF(y) = x$$

egyenlet egyetlen megoldása. (Fizikus jelölés: $-\beta$ az előző fejezet λ-ja.)

Bizonyítás helyett formális számolás: Legyen ξ diszkrét

$$\mathbf{P}(\xi = E_k) = p_k, \qquad \sum_k p_k = 1$$

eloszlású. Ekkor

$$\mathbf{P}\left(\xi_1 = E_k \mid \frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_N}{N} \in (x - \varepsilon, x + \varepsilon) \right) = \frac{\mathbf{P}(\xi_1 = E_k) \mathbf{P}\left(\frac{\xi_2 + \xi_3 + \cdots + \xi_N}{N-1} \in \left(\frac{N(x-\varepsilon) - E_k}{N-1}, \frac{N(x+\varepsilon) - E_k}{N-1} \right) \right)}{\mathbf{P}\left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_N}{N} \in (x - \varepsilon, x + \varepsilon) \right)}$$

Cramér tételét alkalmazva:

$$\mathbf{P}\left(\frac{\xi_1+\xi_2+\cdots+\xi_N}{N}\in(x-\varepsilon,x+\varepsilon)\right)\approx\exp\{-NI(x)+o(N)\}$$
$$\mathbf{P}\left(\frac{\xi_2+\xi_3+\cdots+\xi_N}{N-1}\in(\frac{N(x-\varepsilon)-E_k}{N-1},\frac{N(x++\varepsilon)-E_k}{N-1})\right)$$
$$\approx\exp\{-(N-1)I(x+\frac{x-E_k}{N})+o(N)\}$$

azaz

$$\mathbf{P}\left(\xi_1=E_k \mid \frac{\xi_1+\xi_2+\cdots+\xi_N}{N}\in(x-\varepsilon,x+\varepsilon)\right)$$
$$\approx p_k\exp\{(NI(x)-(N-1)I(x+(x-E_k)/N))-(o(N)-o(N))\}$$
$$=p_k\exp\{I(x)-I'(x)(x-E_k)+o(1)\}$$
$$\to\exp\{I(x)-xI'(x)\}\exp\{I'(x)E_k\}p_k.$$

Az utolsó lépésben a

$$o(N)-o(N)=o(1)$$

becslés a Cramér-tétel bizonyításánál finomabb érvelésből következik. E részleteket mellőzzük. A fenti kifejezésekben

$$I'(x)=\lambda^*(x)+\big(x-\hat{I}'(\lambda^*(x))\big)\lambda^{*\prime}(x)=\lambda^*(x),=-\beta$$
$$I(x)-xI'(x)=I(x)-x\lambda^*(x)=-\hat{I}(\lambda^*(x))=-\ln Z(\beta).$$

Azaz pontosan a *jól normált* kanonikus eloszlást kaptuk!

□

4. Házi feladat. Legyen $(v_1,v_2,\dots,v_N)\in\mathbb{R}^N$ egyenletes eloszlású a

$$\frac{v_1^2}{2}+\frac{v_2^2}{2}+\cdots+\frac{v_N^2}{2}=N\epsilon$$

gömbfelületen, ahol $\epsilon\in(0,\infty)$ rögzített. Határozzuk meg v_1 határeloszlását:

$$\lim_{N\to\infty}\mathbf{P}\left(v_1<x\right)=?$$

5. Házi feladat. Legyen $(x_1, x_2, \dots, x_N) \in \mathbb{R}_+^N$ egyenletes eloszlású az

$$x_1 + x_2 + \cdots + x_N = N\epsilon$$

szimplexen, ahol $\epsilon \in (0, \infty)$ rögzített. Határozzuk meg x_1 határeloszlását:

$$\lim_{N\to\infty} \mathbf{P}\left(v_1 < x\right) = ?$$

6. Házi feladat. [26] III. fejezet, 34. feladat (154. oldal): *A kanonikus eloszlás egy alternatív jellemzése:* Legyen

$$\mathbf{P}\left(\xi = E_i\right) = p_i, \qquad \sum_i p_i = 1$$

diszkrét eloszlás (E_i= energia értékek, spektrum). Az eloszlás q_i referencia-eloszlásra vonatkozó *relatív entrópiája:*

$$S = -\sum_i p_i \ln \frac{p_i}{q_i},$$

az *átlagos („belső”) energia:*

$$U = \sum_i p_i E_i,$$

a *szabad energia:*

$$F = U - \frac{1}{\beta} S.$$

Határozzuk meg azt a p_i^* eloszlást, ami a szabad energiát *minimalizálja.* (Használjuk a Lagrange-féle multiplikátor módszert.)

Válasz: a keresett eloszlás éppen a

$$p_i^* = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i} q_i$$

kanonikus eloszlás.

2.3. Az Ising-modell

„…sok elemi apróból összeálló nagy rendszer …”. A legegyszerűbb választás: az elemi, apró komponensek *két állapotúak*: $\{-1,+1\}$. Az N darab elemiből álló nagy rendszer állapottere:

$$\Omega_N := \{-1,+1\}^N = \{\underline{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N) : \sigma_k = \pm 1\}, \qquad |\Omega_N| = 2^N$$

(Az egyes σ_i-k „klasszikus spinek”.)

A Hamilton-függvény: egy spin energiája önmagában $= -h\sigma_i$; a legegyszerűbb kölcsönhatás: (i,j) pár kölcsönhatási energiája $= -J_{i,j}\sigma_i\sigma_j$. A rendszer teljes energiája:

$$H_N(\underline{\sigma}) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} J_{i,j}\sigma_i\sigma_j - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i.$$

Az első összegben az $i=j$ ‘átlós’ tagoknak semmi jelentősége: akár el is hagyhatjuk őket. Ez az Ising-modell Hamilton-függvénye.

Interpretáció: σ_i-k kis mágnes tűcskék, amik így: $\uparrow$ vagy így: $\downarrow$ tudnak állni; kölcsönhatnak egy h külső mágneses térrel és páronként egymással. Ha $J_{i,j} > 0$: az (i,j) spin pár energiája így: $\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$ kicsi, így: $\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$ nagy, azaz: szeretnek *párhuzamosan* állni: *ferromágneses kölcsönhatás*. Ha $J_{i,j} < 0$: az (i,j) spin pár energiája így: $\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$ nagy, így: $\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$ kicsi, azaz szeretnek *ellen-párhuzamosan* állni: *antiferromágneses kölcsönhatás*. Egyelőre többnyi re a ferromágnesessel fogunk foglalkozni.

$J_{i,j}$ tartalmazza a rendszer *geometriai struktúráját*. Néhány nevezetes példa:

- 1 dimenziós modell:

$$i, j, \dots \in \{1, 2, \ldots, N\}, \qquad J_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{ha} \quad |i-j| = 1 \\ 0 & \text{ha} \quad |i-j| \neq 1 \end{cases}$$

  és peremfeltételek.

- d dimenziós modell:

$$i, j, \dots \in \Lambda \subset \mathbb{Z}^d, \qquad J_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{ha} \quad |i-j| = 1 \\ 0 & \text{ha} \quad |i-j| \neq 1 \end{cases}$$

  és peremfeltételek

- Ising-modell tetszőleges $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ gráfon:

$$i, j, \dots \in \mathcal{V}, \qquad J_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{ha} \quad (i,j) \in \mathcal{E} \\ 0 & \text{ha} \quad (i,j) \notin \mathcal{E} \end{cases}$$

- Curie – Weiss-modell = az előbbi $\mathcal{G} = \mathcal{K}_N$-el

$$i, j, \dots \in \{1, 2, \dots, N\}, \qquad J_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{N} & \text{ha} \quad i \neq j \\ 0 & \text{ha} \quad i = j \end{cases}$$

Az igazán érdekes dolgok $N \to \infty$ *termodinamikai limesz*ben történnek!

2.4. A nyomás / szabadenergia

Az állapotösszeg és a nyomás (vagy szabadenergia – fizikai interpretáció szerint, erre visszatérünk):

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, h) :=& \sum_{\underline{\sigma} \in \Omega_N} \exp\{-\beta H(\underline{\sigma})\} \\ =& \sum_{\underline{\sigma} \in \Omega_N} \exp\{\frac{\beta}{2} \sum_{i,j=1}^{N} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j + \beta h \sum_{i=1}^{N} \sigma_i\} \\ p_N(\beta, h) :=& \frac{1}{\beta N} \ln Z_N(\beta, h) \end{aligned}$$

Miért érdekes? (Azon túl, hogy Z_N a Gibbs-mérték normáló faktora.) Fizikailag releváns mennyiségek meghatározhatóak belőle. Pl. az átlagos *mágnesezettség* így:

$$m_N(\beta, h) := \frac{\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \rangle}{N} = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial Z_N}{\partial h}(\beta, h) = \frac{\partial p_N}{\partial h}(\beta, h).$$

Vagy a *szuszceptibilitás* (azaz a mágnesezettség érzékenysége a külső mágneses tér változására), így:

$$\chi_N(\beta, h) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial m_N}{\partial h}(\beta, h) = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 p_N}{\partial h^2}(\beta, h).$$

A nyomás valószínűségszámítási jelentése: fix β mellett $h \mapsto p_N(\beta, h)$ analóg a nagy eltérés tétel-beli $\lambda \mapsto \hat{I}(\lambda)$ logaritmikus momentum generáló függvénnyel.

10. Állítás (A termodinamikai nyomás konvexitása)**.** *Fix β mellett, $h \mapsto p_N(\beta, h)$ konvex függvény.*

Nyomás konvexitásának bizonyítása.

$$\begin{aligned} \chi_N(\beta,h) &= \frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2 p_N}{\partial h^2}(\beta,h) \\ &= \frac{1}{N}\frac{1}{\beta^2 Z_N}\frac{\partial^2 Z_N}{\partial h^2} - \frac{1}{N}\left(\frac{1}{\beta Z_N}\frac{\partial Z_N}{\partial h}\right)^2 \\ &= \left\langle \left(\frac{\sum_{i=1}^N (\sigma_i - \langle\sigma_i\rangle)}{\sqrt{N}}\right)^2 \right\rangle \geq 0. \end{aligned} \tag{2.2}$$

□

2. Megjegyzés. *Ez az Állítás egy általánosabb (később tárgyalt) konvexitás speciális esete.*

Milyen érdekességekre számíthatunk $N \to \infty$ termodinamikai limeszben? Tegyük fel, hogy a következő limeszek léteznek

$$p(\beta,h) = \lim_{N\to\infty} p_N(\beta,h), \tag{2.3}$$

$$m(\beta,h) = \lim_{N\to\infty} m_N(\beta,h), \tag{2.4}$$

$$\chi(\beta,h) = \lim_{N\to\infty} \chi_N(\beta,h), \tag{2.5}$$

és hogy $\lim_{N\to\infty}$ és $\partial/\partial h$ felcserélhetők, azaz

$$m(\beta,h) = \frac{1}{\beta}\frac{\partial p}{\partial h}(\beta,h) \tag{2.6}$$

$$\chi(\beta,h) = \frac{1}{\beta}\frac{\partial m}{\partial h}(\beta,h) = \frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2 p}{\partial^2 h}(\beta,h) \tag{2.7}$$

Ezeket szigorúan be fogjuk látni: a (2.3), (2.4), (2.5) termodinamikai limeszek épeszű esetekben léteznek, a (2.6), (2.7) azonosságok pedig érvényesek azokban a (β, h) pontokban, amelyekben a limeszfüggvények szép simák.

- *Magas hőmérsékleten $\beta < \beta_c$: $h \mapsto p(\beta, h)$* konvex, analitikus (hasonlóan $\lambda \mapsto \hat{I}(\lambda)$-hoz). És

$$\lim_{h\to 0} m(\beta,h) = m(\beta,0) = 0.$$

Azaz: a rendszer belső $\mathbb{Z}_2$ szimmetriája *nem sérül*. A σ_i valószínűségi változók $\sum_{i=1}^{N} \sigma_i/N$ normált összegének viselkedése kvalitatíve nagyon hasonló az i.i.d. val. változókéval.

- *Alacsony hőmérsékleten $\beta > \beta_c$:* (Ferromágneses kölcsönhatás ($J_{i,j} > 0$) esetén.) $h \mapsto p(\beta, h)$ konvex, de $h = 0$-ban nem analitikus: első deriváltja szakad (ellentétben $\lambda \mapsto \hat{I}(\lambda)$-vel).

$$\lim_{h \searrow 0} m(\beta, h) = m(\beta, 0+) > 0$$
$$\lim_{h \nearrow 0} m(\beta, h) = m(\beta, 0-) = -m(\beta, 0+) < 0$$

  Azaz: a rendszer belső $\mathbb{Z}_2$ szimmetriája *sérül*. A σ_i valószínűségi változók $\sum_{i=1}^{N} \sigma_i/N$ normált összege a NSzT és a NET szempontjából egyaránt az i.i.d.-ktől minőségileg lényegesen eltérő módon viselkedik. $\beta > \beta_c$, $h = 0$ paraméter értékeknél *elsőrendű fázisátmenet* van.

- *A kritikus hőmérsékleten $\beta = \beta_c$:* A szuszceptibilitás divergál

$$\lim_{\beta \to \beta_c} \chi(\beta, 0) = \chi(\beta_c, 0) = \infty,$$

  (2.2) alapján állíthatjuk, hogy a CHT *sérül*: a *kritikus fluktuációk* a normálisaknál lényegesen (nagyságrendileg) nagyobbak. $\beta = \beta_c$, $h = 0$ paraméter értéknél *másodrendű fázisátmenet* van.

A fejezethez kapcsolódó irodalom: [25], [26].

3. fejezet

A Curie – Weiss-modell

3.1. A modell; termodinamikai limesz és termodinamikai függvények

Az állapottér:

$$\Omega_N := \{\underline{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) : \sigma_i = \pm 1\}.$$

A Hamilton-függvény:

$$H_N(\underline{\sigma}) := -\frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$$

'Mean field' ('átlag tér') elmélet, mert minden spin egy

$$h_{\text{eff}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \sigma_j + h$$

effektív, átlagos mágneses térrel hat kölcsön. ($\frac{1}{N}$ helyett választhatnánk persze $\frac{J}{N}$ kölcsönhatási együtthatókat: a J-t beolvasztjuk a β-ba.) A modellnek triviális a geometriai struktúrája! Minden spin-pár egyformán hat kölcsön. Jelöljük a teljes mágnesezettséget M-el:

$$M := \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \qquad M \in \{-N, -N+2, \dots, N-2, N\}.$$

Ekkor

$$H_N = -\frac{1}{2}\frac{M^2}{N} - hM, \tag{3.1}$$

azaz a Hamilton-függvény csak M-en keresztül függ a $\underline{\sigma}$ spin konfigurációtól. Legyen r (illetve $N-r$) a $\uparrow$ (illetve $\downarrow$) spinek száma:

$$r = \frac{N+M}{2}, \qquad N-r = \frac{N-M}{2}, \qquad r \in \{0,1,2,\ldots,N\}.$$

Az állapotösszeg:

$$Z_N(\beta,h) = \sum_{\underline{\sigma}\in\Omega_N} \exp\{-\beta H_N(\underline{\sigma})\} = \sum_{r=0}^{N} c_N(r),$$

ahol

$$c_N(r) = \binom{N}{r} \exp\left\{\frac{\beta}{2N}(2r-N)^2 + \beta h(2r-N)\right\}.$$

Nyilvánvaló, hogy

$$\beta p(\beta,h) = \lim_{N\to\infty} \frac{\ln Z_N}{N} = \lim_{N\to\infty} \frac{\max_{0\le r\le N} \ln c_N(r)}{N}. \tag{3.2}$$

Legyen

$$x = \frac{2r-N}{N}, \qquad x \in [-1,1].$$

A Stirling-formula alkalmazásával a következő kifejezést kapjuk:

$$\ln c_N(r) = N\big(\beta hx - \Phi_\beta(x)\big) + o(N), \tag{3.3}$$

ahol

$$\Phi_\beta(x) = \begin{cases} \frac{1-x}{2}\ln\frac{1-x}{2} + \frac{1+x}{2}\ln\frac{1+x}{2} - \frac{\beta x^2}{2} & \text{ha} \quad x \in [-1,1] \\ \infty & \text{ha} \quad x \notin [-1,1] \end{cases}$$

Felhasználva (3.2)-t és (3.3)-at a termodinamikai nyomásra a következő kifejezést kapjuk

$$\beta p(\beta,h) = \sup_{-1\le x\le 1} (\beta hx - \Phi_\beta(x)).$$

Természetesen $\sup_{-1\le x\le 1}$ helyett $\sup_{x\in\mathbb{R}}$-t is írhattunk volna. Azaz: rögzített β mellett, $h \mapsto p(\beta,h)$ pontosan $x \mapsto \beta^{-1}\Phi_\beta(x)$ konvex konjugáltja. Szükségünk lesz a $x \mapsto \Phi_\beta(x)$ függvény első két deriváltjára:

$$\begin{aligned}\Phi'_\beta(x) &= \frac{1}{2}\ln\frac{1+x}{1-x} - \beta x = \tanh^{-1}(x) - \beta x,\\ \Phi''_\beta(x) &= \frac{1}{1-x^2} - \beta.\end{aligned}$$

Az $x \mapsto \Phi_\beta(x)$ és $x \mapsto \Phi'_\beta(x)$ függvények grafikus képe az 1. és 2. ábrán látható. Lényeges különbség van $\beta < 1$ és $\beta > 1$ között! Míg $\beta < 1$-re $x \mapsto \Phi_\beta(x)$ szigorúan konvex, $x \mapsto \Phi'_\beta(x)$ szigorúan növekvő, $\beta > 1$-re ez nem áll. A kritikus hőmérséklet: $\beta_c = 1$.

IDE JONNEK AZ ABRAK

3.2. A termodinamikai függvények meghatározása

Legyen $m(\beta,h)$ a

$$\Phi'_\beta(m) = \beta h \tag{3.4}$$

„jó” megoldása: ahol egy megoldás van ott *a* megoldás, ahol több megoldás van (kettő vagy három) ott az a megoldás, amelyiknek az előjele megegyezik h előjelével (ld. a 2. ábrát). Az alábbiak a (3.4) egyenlet ekvivalens alakjai:

$$\begin{aligned}\tanh^{-1}(m) - \beta m &= \beta h \qquad (3.5)\\ m &= \tanh\big(\beta(m+h)\big)\end{aligned}$$

A nyomásra a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned}\beta p(\beta,h) &= \beta h m - \Phi_\beta(m)\\ &= \beta h m - \frac{1}{2}\ln\frac{1-m^2}{4} - m\tanh^{-1}(m) + \frac{\beta}{2}m^2\\ &= -\frac{1}{2}\ln\frac{1-m^2}{4} + m\big(\beta h - \tanh^{-1}(m)\big) + \frac{\beta}{2}m^2\end{aligned}$$

(3.5)-öt felhasználva azt kapjuk, hogy

$$\beta p(\beta,h) = -\frac{1}{2}\ln\frac{1-m^2(\beta,h)}{4} - \frac{\beta}{2}m^2(\beta,h).$$

A szuszceptibilitás kiszámolása: az

$$m = \frac{\partial p}{\partial h} = \frac{1}{\beta}\left(\frac{1}{1-m^2} - \beta\right) m \frac{\partial m}{\partial h}$$

egyenletből azt kapjuk, hogy

$$\chi(\beta, h) = \frac{1}{\beta}\frac{\partial m}{\partial h}(\beta, h) = \frac{1-m^2(\beta,h)}{1-\beta(1-m^2(\beta,h))}.$$

Mindebből látható, hogy

(1) $\beta < \beta_c = 1$-re (azaz $T > T_c = 1$-re): $h \mapsto m(\beta, h)$ monoton növekvő, *analitikus*; $h \mapsto p(\beta, h)$ szigorúan konvex, *analitikus*; $\chi(\beta, h)$ véges.

(2) $\beta > \beta_c = 1$-re (azaz $T < T_c = 1$-re): $h \mapsto m(\beta, h)$ monoton növekvő, de $h = 0$-ban nem folytonos: $m(\beta, 0+) = -m(\beta, 0-) > 0$; $h \mapsto p(\beta, h)$ szigorúan konvex, de $h = 0$-ban *nem analitikus*: az első deriváltja szakad; $\chi(\beta, h)$ véges.

(3) $\beta = \beta_c = 1$-re (azaz $T = T_c = 1$-re): $h \mapsto m(\beta, h)$ monoton növekvő; $h \mapsto p(\beta, h)$ szigorúan konvex, $h \neq 0$-ban analitikus, de $\chi(\beta_c, 0) = \infty$.

A (3.4) *állapotegyenlet* grafikus megjelenítései a 3. ábrán látható *fázisdiagrammok*.

3.3. Kritikus exponensek

Általános fizikus hit, hogy egy Ising-szerű ferromágneses modellben, a $(T, h) = (T_c, 0)$ kritikus pont környékén a termodinamikai függvények szinguláris viselkedése a következő

$$\begin{aligned} m(T, 0+) &\sim |T - T_c|^{\beta} && \text{amint} && T \nearrow T_c, \\ \chi(T, 0+) &\sim |T - T_c|^{-\gamma} && \text{amint} && T \searrow T_c \\ \chi(T, 0+) &\sim |T - T_c|^{-\gamma'} && \text{amint} && T \nearrow T_c \\ |m(T_c, h)| &\sim |h|^{1/\delta} && \text{amint} && h \to 0 \end{aligned}$$

ahol a kritikus exponensek, úgymond, *univerzális* jellemzők — csak nagyon általános paraméterektől (pl. a dimenziótól) függenek. A Curie – Weiss-modellre a következő exponenseket találjuk

$$\beta = \frac{1}{2}, \qquad \gamma = \gamma' = 1, \qquad \delta = 3.$$

7. Házi feladat. Számoljuk ki a fenti exponenseket a Curie – Weiss-modellre.

IDE JON A HARMADIK ABRA

3.4. Mindezek valószínűségszámítási háttere/jelentése

Tekintsük a

$$\sigma_1 + \sigma_2 + \cdots + \sigma_N$$

valószínűségi változót a $\beta > 0$, $h = 0$ paraméterekhez tartozó Gibbs-eloszlás szerint. Ezt hasonlítjuk össze az első órákon tárgyalt

$$\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_N$$

i.i.d. összegek viselkedésével, ahol a ξ_i-k egyenkénti eloszlása azonos a σ_i-jével:

$$\mathbf{P}\left(\xi_i = \pm 1\right) = \mathbf{P}\left(\sigma_i = \pm 1\right) = \frac{1}{2} \tag{3.6}$$

Nagy számok törvénye:

$$\mathbf{E}\left(\left(\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N}\right)^2\right) = \frac{2}{N}\frac{\partial \ln Z_N}{\partial \beta}(\beta, 0) = 2\frac{\partial}{\partial \beta}\big(\beta p(\beta, 0)\big) = m^2(\beta, 0)$$

$$\mathbf{Var}\left(\left(\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N}\right)^2\right) = \frac{4}{N^2}\frac{\partial^2 \ln Z_N}{\partial \beta^2}(\beta, 0) = \frac{4}{N}\frac{\partial^2}{\partial \beta^2}\big(\beta p(\beta, 0)\big) \to 0.$$

Amiből következik, hogy

- *Magas hőmérsékleten, $\beta < \beta_c$:*

  $$\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N} \xrightarrow{\mathbf{P}} 0$$

  csakúgy, mint az i.i.d.-k esetében.

- *Alacsony hőmérsékleten ($\beta > \beta_c$):*

  $$\mathbf{P}\left(\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N} \in (\pm|m(\beta, 0)| - \varepsilon, \pm|m(\beta, 0)| + \varepsilon)\right) \to \frac{1}{2}$$

  Azaz: Alacsony hőmérsékleten a NSzT sérül.

Nagy eltérések: Jelölés: $\lambda = \beta h$

$$\frac{Z_N(\beta, h)}{Z_N(\beta, 0)} = \mathbf{E}\left(\exp\left\{\lambda \sum_{i=1}^{N} \sigma_i\right\}\right).$$

Az első jegyzet jelölésével, az $\hat{I}(\lambda)$ logaritmikus momentumgeneráló függvény fizikai jelentése: *a nyomás*:

$$\hat{I}(\lambda) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \mathbf{E}\left(\exp\left\{\lambda \sum_{i=1}^{N} \sigma_i\right\}\right) = \beta p(\beta, h) - \beta p(\beta, 0).$$

- *Magas hőmérsékleten:* $\lambda \mapsto \hat{I}(\lambda)$ konvex és analitikus, csakúgy, mint az i.i.d.-k esetében.
- *Alacsony hőmérsékleten:* $\lambda \mapsto \hat{I}(\lambda)$ konvex de $\lambda = 0$-ban törik, ellentétben az i.i.d.-k esetével.

A nagy eltérések valószínűségének exponenciális lecsengését vezérlő $I(x)$ ráta függvény fizikai jelentése: *a szabadenergia*:

$$I(x) = -\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \mathbf{P}\left(\frac{\sum_{i=1}^{N} \sigma_i}{N} \approx x\right) = \Phi_\beta(x) - \inf_{-1\le x\le 1} \Phi_\beta(x).$$

- *Magas hőmérsékleten:* $x \mapsto I(x)$ szigorúan konvex, csakúgy, mint az i.i.d.-k esetében.
- *Alacsony hőmérsékleten:* $x \mapsto I(x)$ nem konvex, ellentétben az i.i.d.-k esetével. Azaz: alacsony hőmérsékleten ($T < T_c$) a megszokott NET sérül.

3. Megjegyzés. *Véges dimenziós 'igazi' geometriai struktúrával rendelkező modelleknél azt fogjuk látni, hogy a megfelelő függvény – a szabadenergia – ugyan konvex, de nem szigorúan konvex, van egy lapos (lineáris) része, ugy néz ki, mint a $\Phi_\beta(x)$ függvény alsó konvex burkolója. Ami szintén a megszokott NET sérülését jelzi.*

Normális fluktuációk magas hőmérsékleten: A várható érték:

$$\mathbf{E}\left(\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{\sqrt{N}}\right) = m_N(\beta, 0) = 0.$$

A szórásnégyzet:

$$\mathbf{E}\left(\left(\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{\sqrt{N}}\right)^2\right) = \chi_N(\beta, 0) \to \chi(\beta, 0) = \frac{1}{1-\beta}.$$

11. Tétel (CHT magas hőmérsékleten)**.** *Ha $\beta < \beta_c = 1$, akkor*

$$\mathbf{P}\left(\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{\sqrt{N}} < x\right) \to \sqrt{\frac{1-\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} \exp\left\{-\frac{1-\beta}{2}y^2\right\} dy.$$

Magas hőmŕsékleti CHT bizonyítása karakterisztikus függvények módszerével. Legyen

$$\varphi(u) := 2^{-N} \sum_{r=0}^{N} \binom{N}{r} \exp\left\{\frac{\beta}{2}\frac{(2r-N)^2}{N} + iu\frac{2r-N}{\sqrt{N}}\right\}.$$

Akkor

$$\mathbf{E}\left(\exp\left\{iu\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{\sqrt{N}}\right\}\right) = \frac{\varphi(u)}{\varphi(0)}.$$

$\varphi(u)$-ra a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned}
\varphi(u) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} 2^{-N} \sum_{r=0}^{N} \binom{N}{r} \exp\left\{\frac{\sqrt{\beta}x + iu}{\sqrt{N}}(2r-N)\right\} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \left[\cosh\left(\frac{\sqrt{\beta}x + iu}{\sqrt{N}}\right)\right]^N \\
&\to \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \exp\left\{\frac{1}{2}(\sqrt{\beta}x + iu)^2\right\} \\
&= \frac{1}{1-\beta} e^{-\frac{t^2}{2(1-\beta)}}
\end{aligned}$$

Azaz

$$\mathbf{E}\left(\exp\left\{iu\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{\sqrt{N}}\right\}\right) \to e^{-\frac{u^2}{2(1-\beta)}},$$

amiből az állítás következik. □

Kritikus fluktuációk: A következő *nem centrális* határeloszlás-tételt bizonyítjuk a spinösszeg kritikus hőmérsékleti fluktuációira:

12. Tétel (R. S. Ellis és Ch. M. Newman tétele)**.** *$\beta = \beta_c = 1$ és $h = 0$ paraméter értékek mellett*

$$\mathbf{P}\left(\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N^{3/4}} < x\right) \to \frac{\int_{-\infty}^x e^{-y^4/12}dy}{\int_{-\infty}^\infty e^{-y^4/12}dy}. \tag{3.7}$$

Ellis és Newman tételének bizonyítása. Legyen X a σ_i-ktől független standard Gauss eloszlású valószínűségi változó. Belátjuk, hogy

$$\mathbf{P}\left(\frac{X}{N^{1/4}} + \frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N^{3/4}} < x\right) = \frac{\int_{-\infty}^x \exp\{-N\psi(y/N^{1/4}\}dy}{\int_{-\infty}^\infty \exp\{-N\psi(y/N^{1/4}\}dy}, \tag{3.8}$$

ahol

$$\psi(x) := \frac{x^2}{2} - \ln\cosh x. \tag{3.9}$$

Mivel

$$\frac{X}{N^{1/4}} \xrightarrow{\mathbf{P}} 0$$

és (3.8) jobb oldala konvergál (3.7) jobb oldalához, amint $N \to \infty$, (3.8)-ból a Tétel állítása következik.

A következő levezetésben Z_N normáló faktorokat jelöl: a különböző képletekben nem föltétlenül azonosokat. Legyen

$$F_N(y) = \mathbf{P}\left(\sum_{i=1}^N \sigma_i < y\right)$$

a spinösszeg eloszlásfüggvénye és

$$G_N(y) = \mathbf{P}\left(\sum_{i=1}^N \xi_i < y\right),$$

ahol a ξ_i-k (3.6) eloszlású i.i.d.-k Világos, hogy (3.1) alapján

$$dG_N(y) = \frac{1}{Z_N} e^{-\frac{y^2}{2N}} dF_N(y). \tag{3.10}$$

(3.8) bizonyítása következik:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{P}\left(\frac{X}{N^{1/4}}+\frac{\sum_{i=1}^N \sigma_i}{N^{3/4}}<x\right) &= \mathbf{P}\left(\sqrt{N}X+\sum_{i=1}^N \sigma_i < N^{3/4}x\right)\\
&\stackrel{1}{=}\frac{1}{Z_N}\int_{-\infty}^{N^{3/4}x}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\frac{y^2-2yz+z^2}{2N}\right\}dF_N(z)dy\\
&\stackrel{2}{=}\frac{1}{Z_N}\int_{-\infty}^{N^{3/4}x}\exp\left\{-\frac{y^2}{2N}\right\}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{\frac{yz}{N}\right\}\exp\left\{-\frac{z^2}{2N}\right\}dF_N(z)dy\\
&\stackrel{3}{=}\frac{1}{Z_N}\int_{-\infty}^{N^{3/4}x}\exp\left\{-\frac{y^2}{2N}\right\}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{\frac{yz}{N}\right\}dG_N(z)dy\\
&\stackrel{4}{=}\frac{1}{Z_N}\int_{-\infty}^{N^{3/4}x}\exp\left\{-\frac{y^2}{2N}\right\}\exp\left\{N\ln\cosh\frac{y}{N}\right\}dy\\
&\stackrel{5}{=}\frac{1}{Z_N}\int_{-\infty}^{N^{3/4}x}\exp\left\{-N\left[\frac{(y/N)^2}{2}-\ln\cosh(y/N)\right]\right\}dy\\
&\stackrel{6}{=}\frac{1}{Z_N}\int_{-\infty}^{N^{3/4}x}\exp\{-N\psi(y/N)\}dy\\
&\stackrel{7}{=}\frac{1}{Z_N}\int_{-\infty}^{x}\exp\{-N\psi(y/N^{1/4})\}dy,
\end{aligned}
$$

ami pontosan (3.8). Az első lépésben azt használtuk, hogy független valószínűségi változók összegének eloszlásfüggvénye az egyes eloszlásfüggvények konvolúciója. A második lépés triviális. A harmadik lépésben (3.10)-et használtuk fel. A negyedikben azt, hogy

$$
\mathbf{E}\left(\exp\left\{y\sum_{i=1}^N \xi_i\right\}\right)=\big(\cosh(y)\big)^N.
$$

Az ötödik lépés újból triviális. A hatodikban a ψ függvény (3.9) definícióját használtuk. Végül a hetedik lépésben egy $y := N^{3/4}y$ változócserét hajtottunk végre. $\square$

A fejezethez kapcsolódó irodalom: [2], [5].

4. fejezet

Ising-modell $\mathbb{Z}^d$-n; termodinamikai limesz

4.1. Egydimenziós Ising-modell

Fizikai tér: egydimenziós diszkrét tórusz $i, j, \dots \in \mathbb{Z}/L$

$$J_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{ha} \quad |(i-j) \bmod L| = 1 \\ 0 & \text{ha} \quad |(i-j) \bmod L| \neq 1 \end{cases}$$

A Hamilton-függvény (mint rendesen):

$$H_L(\underline{\sigma}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{L} J_{i,j}\sigma_i\sigma_j - h\sum_{i=1}^{L}\sigma_i = -\sum_{i=1}^{L}\sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_{i=1}^{L}\sigma_i,$$

periodikus peremfeltételekkel, azaz $L + i = i \bmod L$ Az állapotösszeg:

$$Z_L(\beta, h) = \sum_{\underline{\sigma}\in\Omega_L} \exp\{\beta\sum_{i=1}^{L}\sigma_i\sigma_{i+1} + \beta h\sum_{i=1}^{L}\sigma_i\}.$$

Legyen $T = T(\beta, h)$ a következő 2×2-es mátrix

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta(1+h)} & e^{-\beta} \\ e^{-\beta} & e^{\beta(1-h)} \end{pmatrix}$$

13. Állítás.

$$Z_L(\beta, h) = \mathrm{Tr}T^L.$$

Bizonyítás: Egyszerű számolás. □

8. Házi feladat. Igazoljuk a 13. Állítást.

Következésképp a T mátrix sajátértékeit kell kiszámolnunk, amelyek a

$$\lambda^2 - 2\lambda e^{\beta} \cosh(\beta h) + 2\sinh(2\beta) = 0$$

karakterisztikus egyenlet gyökei:

$$\lambda_{1,2}(\beta, h) = e^{\beta} \cosh(\beta h) \pm \left(e^{2\beta} \sinh^2(\beta, h) + e^{-2\beta}\right)^{1/2}.$$

A nyomásra a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned}\beta p(\beta, h) &= \lim_{N\to\infty} \beta p_L(\beta, h) = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \ln\left(\lambda_1^L(\beta, h) + \lambda_2^L(\beta, h)\right)\\ &= \ln \max\{\lambda_1(\beta, h), \lambda_2(\beta, h)\}.\end{aligned}$$

Azaz

$$\beta p(\beta, h) = \ln\left(e^{\beta} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta}}\right).$$

Tehát az egydimenziós, első szomszéd kölcsönhatású modell termodinamikai nyomását explicit módon ki tudtuk számolni, de az eredmény nem nagyon izgalmas: minden pozitív β mellett $h \mapsto p(\beta, h)$ analitikus. Nincs kritikus jelenség, fázisátmenet. *Általában: egydimenziós, rövid kölcsönható sugarú modellekben nincsen fázisátmenet.*

9. Házi feladat. Számoljuk ki a termodinamikai nyomást a Bethe-rácson (azaz a $q > 2$ fokú homogén fán). Ez elég hosszadalmas számolás, de megéri a fáradságot, mert tanulságos.

4.2. Ising-modell $\mathbb{Z}^d$-n

Fizikai tér: $x, y, \dots \in \mathbb{Z}^d$ (vagy annak egy véges része).

$$J_{x,y} = \begin{cases} 1 & \text{ha} \quad |x-y| = 1 \\ 0 & \text{ha} \quad |x-y| \neq 1 \end{cases}$$

Legyen $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ véges, téglatest alakú része a d dimenziós egész rácsnak. A Hamilton-függvény:

$$H_\Lambda(\underline{\sigma}) = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{x,y\in\Lambda \\ |x-y|=1}} \sigma_x\sigma_y - h\sum_{x\in\Lambda}\sigma_x.$$

Szabad peremfeltételeket választottunk (választhatunk volna újból periodikus peremfeltételeket). Az állapotösszeg természetesen:

$$Z_\Lambda(\beta, h) = \sum_{\underline{\sigma}\in\Omega_\Lambda} \exp\{\frac{\beta}{2} \sum_{\substack{x,y\in\Lambda \\ |x-y|=1}} \sigma_x\sigma_y + \beta h\sum_{x\in\Lambda}\sigma_x\}.$$

Az első alapkérdés a *termodinamikai limesz létezése,* azaz létezik-e a következő határérték:

$$p(\beta, h) = \lim_{\Lambda_n \nearrow\ Z^d} p_{\Lambda_n}(\beta, h) = \lim_{\Lambda_n\nearrow\mathbb{Z}^d} \frac{1}{\beta|\Lambda_n|} \ln Z_{\Lambda_n}(\beta, h) \tag{4.1}$$

Ahol $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ azt jelenti, hogy $\Lambda_n \subset \Lambda_{n+1}$ és $\cup_n\Lambda_n = \mathbb{Z}^d$. Legyen

$$\partial_r\Lambda = \{x \in \Lambda : \mathrm{dist}(x, \Lambda^c) \le r\}.$$

Azt mondjuk, hogy $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ van Hove értelemben, ha $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ és $(\forall r < \infty)$-re

$$\frac{|\partial_r\Lambda_n|}{|\Lambda_n|} \to 0$$

14. Tétel (A termodinamikai limesz létezése.)**.** *Ha $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ van Hove értelemben, akkor létezik a (4.1)-beli limesz és a termodinamikai nyomás független a választott Λ_n sorozattól.*

Bizonyítás. Két dimenzióban, növekvő oldalhosszú négyzetekre fogjuk belátni a tétel állítását. Az általánosítás tetszőleges van Hove értelemben növekvő Λ_n tartományokra kissé hosszadalmas, de elvileg nem nehéz. Általánosítás tetszőleges dimenzióra triviális.

Legyen Λ tetszőleges véges halmaz és H_Λ, H'_Λ két Hamilton-függvény Ω_Λ-n. Jelöljük

$$\|H_\Lambda - H'_\Lambda\| := \max_{\underline{\sigma}\in\Omega_\Lambda} |H_\Lambda(\underline{\sigma}) - H'_\Lambda(\underline{\sigma})|\,.$$

Világos, hogy minden $\underline{\sigma} \in \Omega_\Lambda$-ra

$$e^{-\beta\left\|H_\Lambda - H'_\Lambda\right\|} e^{-\beta H'_\Lambda(\underline{\sigma})} \leq e^{-\beta H_\Lambda(\underline{\sigma})} \leq e^{\beta\left\|H_\Lambda - H'_\Lambda\right\|} e^{-\beta H'_\Lambda(\underline{\sigma})},$$

amiből egyenesen adódik, hogy

$$-\frac{\|H_\Lambda - H'_\Lambda\|}{|\Lambda|} + p'_\Lambda(\beta, h) \leq p_\Lambda(\beta, h) \leq \frac{\|H_\Lambda - H'_\Lambda\|}{|\Lambda|} + p'_\Lambda(\beta, h),$$

azaz

$$|p_\Lambda(\beta, h) - p'_\Lambda(\beta, h)| \leq \frac{\|H_\Lambda - H'_\Lambda\|}{|\Lambda|}. \tag{4.2}$$

Legyen $\Lambda_n = (-\frac{n}{2}, \frac{n}{2}]^2 \cap \mathbb{Z}^2$ és $p_n = p_{\Lambda_n}$. Első lépésként tekintsük az $n = 2^k$ oldalhosszú négyzetek növekvő sorozatát. A $\Lambda_{2^{k+1}}$ négyzetben tekintsük a következő két Hamilton-függvényt:

$$\begin{aligned}
&H_{2^{k+1}}(\underline{\sigma}) = H_{\Lambda_{2^{k+1}}}(\underline{\sigma}),\\
&H'_{2^{k+1}}(\underline{\sigma}) = H_{\Lambda^{(1)}_{2^k}}(\underline{\sigma}|_{\Lambda^{(1)}_{2^k}}) + H_{\Lambda^{(2)}_{2^k}}(\underline{\sigma}|_{\Lambda^{(2)}_{2^k}}) + H_{\Lambda^{(3)}_{2^k}}(\underline{\sigma}|_{\Lambda^{(3)}_{2^k}}) + H_{\Lambda^{(4)}_{2^k}}(\underline{\sigma}|_{\Lambda^{(4)}_{2^k}}),
\end{aligned}$$

ahol $\Lambda^{(1)}_{2^k}, \dots, \Lambda^{(4)}_{2^k}$ a $\Lambda_{2^{k+1}}$ négyzet négy természetes negyede. Azaz: H' a négy, egymással nem kölcsönható negyed belső energiáinak összege. Világos, hogy

$$p'_{2^{k+1}}(\beta, h) = p_{2^k}(\beta, h).$$

(4.2)-t alkalmazva azt kapjuk, hogy

$$|p_{2^{k+1}}(\beta, h) - p_{2^k}(\beta, h)| \leq \frac{1}{2^k},$$

amiből egyenesen következik, hogy

$$\lim_{k\to\infty} p_{2^k}(\beta, h) =: p(\beta, h)$$

létezik és

$$|p_{2^k}(\beta, h) - p(\beta, h)| \leq \frac{1}{2^{k-1}}.$$

Második lépésként tekintsünk tetszőleges oldalhosszú négyzeteket. Az előbbi érvelés könnyen általánosítható a következő képpen: $\forall k, l \geq 1$-re

$$|p_{kl}(\beta, h) - p_k(\beta, h)| \leq \frac{2}{k}.$$

Ebből pedig az adódik, hogy

$$\begin{aligned}
&|p_l(\beta,h)-p(\beta,h)|\le\\
&\qquad\le|p_l(\beta,h)-p_{l2^k}(\beta,h)|+|p_{l2^k}(\beta,h)-p_{2^k}(\beta,h)|+|p_{2^k}(\beta,h)-p(\beta,h)|\\
&\qquad\le\frac{2}{l}+\frac{2}{2^k}+\frac{2}{2^k}.
\end{aligned}$$

k-val végtelenhez tartva pedig

$$|p_l(\beta,h)-p(\beta,h)|\le\frac{2}{l}.$$

10. Házi feladat. A $\Lambda\nearrow\mathbb{Z}^2$ téglalapokra való általánosítás.

4. Megjegyzés. (4.2) *alkalmazásával azt is láthatjuk, hogy a termodinamikai nyomás független a választott peremfeltételektől.*

□

4.3. Kicsit általánosabban

Megengedhetünk több-spin kölcsönhatást is:

$$A\subset\mathbb{Z}^d,\ \ |A|<\infty:\qquad J_A\in\mathbb{R},\ \ \sigma_A=\prod_{x\in A}\sigma_x.$$

A *formális* Hamilton-függvény:

$$H(\underline{\sigma})=-\sum_{A:|A|<\infty}J_A\sigma_A.$$

Eltolásinvariancia:

$$(\forall A:|A|<\infty),\ \ (\forall z\in\mathbb{Z}^d):J_{A+z}=J_A.$$

A modell *ferromágneses*, ha $\forall A\ J_A\ge 0$. Eddig vizsgált – legegyszerűbb – eset:

$$J_A=\begin{cases}h & \text{ha}\quad A=\{x\}\\ 1 & \text{ha}\quad A=\{x,y\},|x-y|=1\\ 0 & \text{egyébként}\end{cases}$$

Végességi feltétel:

$$\sum_{A:0\in A} \frac{|J_A|}{|A|} < \infty. \tag{4.3}$$

Értelme: spinenkénti átlagos energia véges. Párkölcsönhatás esetén: $J_{\{x,y\}} := J_{x-y}$ és a (4.3) feltétel: $\sum_{z\in\mathbb{Z}^d}$
$abs J_z < \infty$.

11. Házi feladat. A termodinamikai limesz létezésének tétele eltolásinvariáns kölcsönhatással, (4.3) feltétel mellett könnyen általánosítható.

4.4. A nyomás konvexitása

Legyen $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ véges és $A, B \subset \Lambda$. Könnyen ellenőrízhető, hogy

$$\frac{\partial Z_\Lambda}{\partial J_A} = \langle \sigma_A \rangle_\Lambda,$$

$$\frac{\partial^2 Z_\Lambda}{\partial J_A \partial J_B} = \langle \sigma_A \sigma_B \rangle_\Lambda - \langle \sigma_A \rangle_\Lambda \langle \sigma_B \rangle_\Lambda,$$

amiből következik, hogy

$$\{J\} \mapsto p_\Lambda$$

és a termodinamikai limeszben

$$\{J\} \mapsto p$$

a $\{J\}$ paramétereknek *együttesen konvex függvénye*. Hasonló módon látható, hogy

$$\frac{1}{\beta} = T \mapsto p$$

is konvex.

Két út áll előttünk:

(1) $p(\beta, h)$ explicit kiszámolását kísérelhetjük meg bizonyos – többnyíre kétdimenziós – modellekben;

(2) $p(\beta, h)$ kvalitatív elemzése, explicit kiszámolás nélkül.

Az explicit kiszámolás külön tudomány („exactly solvable models” ld. pl. [2]), a 2-d Ising-modell megoldásával kezdődött (Lars Onsager, 1944), [2] a tökéletes irodalom. Mi a második utat – azaz: a kvalitatív elemzését – fogjuk követni.

A fejezethez kapcsolódó irodalom: [2], [13], [28].

5. fejezet

Analitikusság I: Kirkwood – Salsburg-egyenletek

5.1. Az Ising-rácsgáz

Az Ising-rácsgáz modell teljesen ekvivalens az eddig tárgyalt mágneses Ising-modellel. Jelen céljainkra (e jegyzeten belül) kényelmesebb formalizmust biztosít. Viszont mindvégig hangsúlyozni fogjuk az ekvivalenciát: az eredményeket végül átfogalmazzuk a mágneses Ising-modellre is.

Fizikai tér: $x, y, \dots \in \mathbb{Z}^d$ vagy annak egy véges Λ része. Az állapottér:

$$\Omega_\Lambda := \{\underline{n} = (n_x)_{x\in\Lambda} : n_x = 0, 1\} = \{0,1\}^\Lambda.$$

Értelmezés: $\underline{n}$ egy rácsgáz mikroszkopikus állapotát írja le. Rácspontonként legfeljebb egy részecske lehet (kemény mag): $n_x = 0$ – nincs részecske az $x \in \Lambda$ rácspontban; $n_x = 1$ – van részecske az $x \in \Lambda$ rácspontban. A teljes részecske számot $|\underline{n}|$-el jelöljük:

$$|\underline{n}| = \sum_{x\in\Lambda} n_x.$$

A Hamilton-függvény:

$$H_\Lambda(\underline{n}) = \frac{1}{2} \sum_{x,y\in\Lambda} \Phi(x-y) n_x n_y.$$

Értelmezés: az $x, y \in \mathbb{Z}^d$ rácspontokban ülő részcske-pár kölcsönhatási energiája $\Phi(x-y) = \Phi(y-x)$. Feltesszük, hogy

$$\Phi(0) = 0.$$

Azaz: nincs ‘önkölcsönhatás’. Stabilitási feltétel (ld. az előző fejezet (4.3) feltételét):

$$\sum_{z\in\mathbb{Z}^d} |\Phi(z)| = M < \infty. \tag{5.1}$$

Legyen

$$\varphi := \sum_{z\in\mathbb{Z}^d} \Phi(z). \tag{5.2}$$

A *nagykanonikus* állapotösszeg:

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(\beta,\mu) &= \sum_{\underline{n}\in\Omega_\Lambda} \exp\{-\beta H_\Lambda(\underline{n}) + \beta\mu \sum_{x\in\Lambda} n_x\} \\ &= \sum_{N=0}^{|\Lambda|} z^N Q_\Lambda(\beta,N), \end{aligned}$$

ahol μ a *kémiai potenciál*,

$$z = \exp\{\beta\mu\}$$

a *fugacitás* és

$$Q_\Lambda(\beta,N) = \sum_{\Omega_\Lambda\ni\underline{n}:|\underline{n}|=N} \exp\{-\beta H_\Lambda(\underline{n})\}$$

a *kanonikus* állapotösszeg. (A szavak persze nem fontosak, de jó megjegyezni őket: azonos mennyiségeknek más-más a fizikai jelentésük attól függően, hogy mágneses- vagy rácsgáz modellként értelmezzük a problémánkat.)

Ekvivalencia a mágneses Ising-modellel:

$$n_x = \frac{\sigma_x+1}{2}, \qquad \sigma_x = 2n_x - 1, \tag{5.3}$$

$$\Phi(x-y) = -4J_{x-y}, \qquad J_{x-y} = -\frac{\Phi(x-y)}{4}, \tag{5.4}$$

$$\mu = 2h - 2\sum_{x\in\mathbb{Z}^d} J_x, \qquad h = \frac{\mu}{2} - \frac{\sum_{x\in\mathbb{Z}^d}\Phi(x)}{4}, \tag{5.5}$$

$$p_{\text{gáz}}(\beta,\mu) = p_{\text{mágnes}}(\beta, 2h+\varphi/2), \quad p_{\text{mágnes}}(\beta,h) = p_{\text{gáz}}(\beta,\mu/2-\varphi/4). \tag{5.6}$$

5.2. Korrelációs függvények

Jelöljük $\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$-vel a $\mathbb{Z}^d$ rács véges részhalmazainak halmazát:

$$\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d) = \{A \in \mathcal{P}(\mathbb{Z}^d) : |A| < \infty\}$$

Véges $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$-ra definiáljuk a következő korrelációs függvényt:

$$\rho_\Lambda : \mathcal{P}(\Lambda) \to [0,1], \qquad \rho_\Lambda(A) = \langle \prod_{x\in A} n_x \rangle_\Lambda.$$

És a termodinamikai limeszben

$$\rho : \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d) \to [0,1], \qquad \rho(A) = \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d} \rho_\Lambda(A), \tag{5.7}$$

amennyiben a határérték létezik és egyérelmű. Célunk: a $\rho(\cdot)$ korrelációs függvény elemzése.

Ha mágneses nyelven beszélnénk a következő korrelációs függvényt tekintenénk:

$$\begin{aligned} m_\Lambda(A) &= \langle \prod_{x\in A} \sigma_x \rangle_\Lambda = \langle \prod_{x\in A} (2n_x - 1) \rangle_\Lambda \\ &= \sum_{B \in \mathcal{P}(A)} (-1)^{|A\setminus B|} 2^{|B|} \rho_\Lambda(B). \end{aligned}$$

12. Házi feladat. Az alább tárgyalt Möbius inverziós formulát alkalmazva mutassuk meg, hogy

$$\rho_\Lambda(A) = 2^{-|A|} \sum_{B\in\mathcal{P}(A)} m_\Lambda(B).$$

Tehát megint azt látjuk, hogy a rácsgáz és a mágneses megfogalmazás ekvivalens egymással: egyikből a másikat könnyen megkaphatjuk. Kizárólag kényelmi okokból válaszottuk a rácsgáz inerpretációt.

5.3. Számolás

Legyen $A \in \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$ és $x \in \mathbb{Z}^d$. Értelmezzük a kövekezőket:

$$\begin{aligned} U(A) &:= \frac{1}{2} \sum_{y,z\in A} \Phi(y-z) \\ W(x,A) &:= \sum_{y\in A} \Phi(x-y) \end{aligned} \tag{5.8}$$

Ezek fizikai értelme világos: $U(A)$ az A halmazt teljesen elfoglaló részecskék egymással való teljes kölcsönhatási energiája, $W(x, A)$ pedig az x-ben levő részecskének az A halmazt teljesen elfoglaló részecskékkel való teljes kölcsönhatási energiája. Ezek segítségével az állapotösszegre és a korrelációs függvényre következő kifejezéseket kapjuk:

$$\begin{aligned} Z_\Lambda &= \sum_{B:B\subset\Lambda} z^{|B|}\exp\{-\beta U(B)\} \\ \rho_\Lambda(A) &= \frac{1}{Z_\Lambda}\sum_{B:A\subset B\subset\Lambda} z^{|B|}\exp\{-\beta U(B)\} \\ &= \frac{1}{Z_\Lambda}\sum_{C:C\subset\Lambda\setminus A} z^{|A\cup C|}\exp\{-\beta U(A\cup C)\} \end{aligned} \tag{5.9}$$

Legyen $A \neq \emptyset$ és válasszunk egy teszőleges $x \in A$-t. Jelöljük $A' = A \setminus \{x\}$. $C \cap A = \emptyset$ esetén a következő azonosság adódik:

$$U(A \cup C) = W(x, A) + W(x, C) + U(A' \cup C).$$

Ezt felhasználva (5.9)-ből a következő kifejezést kapjuk:

$$\rho_\Lambda(A) = \frac{1}{Z_\Lambda} z e^{-\beta W(x,A)} \sum_{C:C\subset\Lambda\setminus A} e^{-\beta W(x,C)} z^{|A'\cup C|} e^{-\beta U(A'\cup C)}. \tag{5.10}$$

5.4. Möbius inverziós formula

Legyen Λ véges halmaz. Értelmezzük az $f : \mathcal{P}(A) \to \mathbb{R}$ függvények halmazán a következő két transzformációt:

$$\begin{aligned} \hat{f}(A) &= \sum_{B:A\subset B\subset\Lambda} f(B) \\ \check{f}(A) &= \sum_{B:A\subset B\subset\Lambda} (-1)^{|B\setminus A|} f(B) \end{aligned}$$

15. Állítás (Möbius inverziós formula)**.** *Tetszőleges $f : \mathcal{P}(A) \to \mathbb{R}$ függvényre*

$$\check{\hat{f}} = f = \hat{\check{f}}.$$

Möbius inverziós formula bizonyítása:

$$\begin{aligned}\hat{\check{f}}(A) &= \sum_{B:A\subset B\subset\Lambda} \check{f}(B) = \sum_{B:A\subset B\subset\Lambda}\ \sum_{C:B\subset C\subset\Lambda} (-1)^{|C\setminus B|} f(C) \\ &= \sum_{C:A\subset C\subset\Lambda} f(C) \sum_{B:A\subset B\subset C} (-1)^{|C\setminus B|} = \sum_{C:A\subset C\subset\Lambda} f(C)\delta_{C,A} = f(A).\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\check{\hat{f}}(A) &= \sum_{B:A\subset B\subset\Lambda} (-1)^{|B\setminus A|}\hat{f}(B) = \sum_{B:A\subset B\subset\Lambda} (-1)^{|B\setminus A|} \sum_{C:B\subset C\subset\Lambda} f(C) \\ &= \sum_{C:A\subset C\subset\Lambda} f(C) \sum_{B:A\subset B\subset C} (-1)^{|B\setminus A|} = \sum_{C:A\subset C\subset\Lambda} f(C)\delta_{C,A} = f(A).\end{aligned}$$

$\square$

5.5. Számolás folytatása

A Möbius inverziót alkalmazva (5.9)-ből a következő azonosságot kapjuk:

$$\frac{1}{Z_\Lambda} z^{|A|} \exp\{-\beta U(A)\} = \sum_{B:A\subset B\subset\Lambda} (-1)^{|B\setminus A|} \rho_\Lambda(B). \qquad (5.11)$$

Ezt behelyettesítjük (5.10)-be

$$
\begin{aligned}
&\rho_\Lambda(A)\\
&\overset{1}{=} z\exp\{-\beta W(x,A)\}\\
&\quad\times\sum_{C:C\subset\Lambda\setminus A}\exp\{-\beta W(x,C)\}\sum_{\substack{D:\\A'\cup C\subset D\subset\Lambda}}(-1)^{|D\setminus(A'\cup C)|}\rho_\Lambda(D)\\
&\overset{2}{=} z\exp\{-\beta W(x,A)\}\\
&\quad\times\sum_{C:C\subset\Lambda\setminus A}\exp\{-\beta W(x,C)\}\sum_{E:C\subset E\subset\Lambda\setminus A}(-1)^{|E\setminus C|}\Big(\rho_\Lambda(A'\cup E)-\rho_\Lambda(A\cup E)\Big)\\
&\overset{3}{=} z\exp\{-\beta W(x,A)\}\\
&\quad\times\sum_{E:E\subset\Lambda\setminus A}\left[\sum_{C:C\subset E}(-1)^{|E\setminus C)|}\exp\{-\beta W(x,C)\}\right]\Big(\rho_\Lambda(A'\cup E)-\rho_\Lambda(A\cup E)\Big)\\
&\overset{4}{=} z\exp\{-\beta W(x,A)\}\\
&\quad\times\sum_{E:E\subset\Lambda\setminus A}\prod_{y\in E}\left(e^{-\beta\Phi(x-y)}-1\right)\Big(\rho_\Lambda(A'\cup E)-\rho_\Lambda(A\cup E)\Big)
\end{aligned}
\tag{5.12}
$$

A fenti levezetés első lépése (5.11) behelyettesítése (5.10)-be. A második lépésben $E = D\setminus A$. A harmadik lépésben a két összegzés sorrendjét cseréltük fel. Végül a negyedik lépésben a $W(x,C)$ (5.8)-beli definícióját helyettesítjük be.

Értelmezzük a következő magfüggvényt:

$$\mathcal{K}:\mathbb{Z}^d\times\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)\to\mathbb{R},\qquad \mathcal{K}(x,D):=\prod_{y\in D}\left(e^{-\beta\Phi(x-y)}-1\right). \tag{5.13}$$

Természetesen $\mathcal{K}(x,\emptyset)=1$ és $\mathcal{K}(x,D)=0$, ha $x\in D$. A $\mathcal{K}(x,D)$ magfüggvényt felhasználva (5.12)-ből azt kapjuk, hogy

$$\rho_\Lambda(\emptyset)=1$$

és

$$
\begin{aligned}
\rho_\Lambda(A)=&\frac{ze^{-\beta W(x,A)}}{1+ze^{-\beta W(x,A)}}\\
&\times\left[\rho_\Lambda(A')+\sum_{\substack{D:\\\emptyset\neq D\subset\Lambda\setminus A}}\mathcal{K}(x,D)\left(\rho_\Lambda(A'\cup D)-\rho_\Lambda(A\cup D)\right)\right],
\end{aligned}
\tag{5.14}
$$

ha $x \in A \neq \emptyset$ és $A' = A \setminus \{x\}$.

A alább definiált Banach-térben fogunk dolgozni:

$$\mathbf{B} = \Big\{ f : \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d) \to \mathbb{R} \;\Big|\; \|f\| := \sup_{A \in \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)} |f(A)| < \infty \Big\}.$$

Természetesen $\rho_\Lambda(\cdot)$ (és $\rho(\cdot)$, amennyiben az (5.7) limesz létezik) eleme a $\mathbf{B}$ Banach-térnek. Jelöljük Π_Λ-val a következő projekció operátorokat $\mathbf{B}$-ben:

$$[\Pi_\Lambda f](A) := \chi_\Lambda(A) f(A), \qquad \text{ahol} \quad \chi_\Lambda(A) := \begin{cases} 1 & \text{ha} \quad A \subset \Lambda \\ 0 & \text{ha} \quad A \not\subset \Lambda \end{cases}.$$

Triviális ellenőrizni, hogy Π_Λ korlátos, sőt

$$\|\Pi_\Lambda\| = 1.$$

Minden $\emptyset \neq A \in \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$-hez rendeljük *kanonikus módon* egy $x_A \in A$ elemét — pl. Z^d egy tetszőleges, de fix lineáris rendezésében lehet $x_A = \min A$, ami egyértelműen meghatározott. Továbbá legyen $A' = A \setminus \{x_A\}$. Az alábbi eredmények természetesen függetlenek lesznek az $x_A \in A$ elem kanonikus kiválasztásától. Adott $z \geq 0$ mellett értelmezzük a következő lineáris operátort $\mathbf{B}$ felett:

$$[K_z f](A) = \begin{cases} 0 & \text{ha} \quad A = \emptyset \\ \dfrac{z e^{-\beta W(x_A, A)}}{1 + z e^{-\beta W(x_A, A)}} & \text{ha} \quad A \neq \emptyset \\ \times \Big[f(A') + \sum_{\substack{D \in \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d): \\ \emptyset \neq D \subset A^c}} \mathcal{K}(x, D) \left(f(A' \cup D) - f(A \cup D) \right) \Big] & \end{cases}$$

16. Állítás. *Minden $z \geq 0$-ra a K_z operátor korlátos és*

$$\|K_z\| \leq \frac{z e^{\beta(M - \varphi)}}{1 + z e^{\beta(M-\varphi)}} \left(2 \exp\{ e^{\beta M} - 1 \} - 1 \right). \tag{5.15}$$

ahol M és φ az (5.1), (5.2)-ben megadott konstansok.

Bizonyítás. Az (5.15) korlát két egyszerű becslésből adódik. Először:

$$-W(x_A, A) = -\sum_{y \in A} \Phi(y - x_A) = \sum_{y \in \mathbb{Z}^d \setminus A} \Phi(y - x_A) - \varphi \leq M - \varphi,$$

amiből adódik, hogy

$$0 < \frac{ze^{-\beta W(x_A,A)}}{1+ze^{-\beta W(x_A,A)}} \le \frac{ze^{\beta(M-\varphi)}}{1+ze^{\beta(M-\varphi)}}. \tag{5.16}$$

Másodszor:

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{D\in\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d):\\ \emptyset\neq D\subset A^c}} |\mathcal{K}(x,D)| &\overset{1}{\le} \sum_{\substack{D\in\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d):\\ D\neq\emptyset}} |\mathcal{K}(x,D)| \\
&\overset{2}{=} \sum_{\substack{D\in\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d):\\ D\neq\emptyset}} \prod_{y\in D} \left|e^{-\beta\Phi(x-y)}-1\right| \\
&\overset{3}{=} \prod_{y\in\mathbb{Z}^d} \left\{\left|e^{-\beta\Phi(y)}-1\right|+1\right\}-1 \\
&\overset{4}{\le} \exp\Big\{\sum_{y\in\mathbb{Z}^d} \left|e^{-\beta\Phi(y)}-1\right|\Big\}-1 \\
&\overset{5}{\le} \exp\Big\{\sum_{y\in\mathbb{Z}^d} \left(e^{|\beta\Phi(y)|}-1\right)\Big\}-1 \\
&\overset{6}{\le} \exp\{e^{\beta M}-1\}-1
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Az első lépés triviális. A második lépésben a $\mathcal{K}(x,D)$ magfüggvény (5.13)-beli értelmezését használtuk. A harmadik lépés egy egyszerű kombinatorikai azonosság. A negyedik lépésben az $1+a \le e^a$, $a\in\mathbb{R}$ egyenlőtlenséget használjuk. Az ötödik lépés újból triviális. Végül a hatodik lépés a $e^a + e^b \le e^{a+b}+1$, $ab\ge 0$ egyenlőtlenségből következik. (5.16)-ból és (5.17)-ből következik (5.15). □

13. Házi feladat. Ellenőrizzük a bizonyítás harmadik lépésében szereplő kombinatorikus azonosságot.

Jelöljük $\mathbb{1}$-el a $\mathbf{B}$ Banach-tér következő nevezetes elemét:

$$\mathbb{1}(A) = \delta_{A,\emptyset}.$$

(5.14)-ből, továbbá Π_Λ, K_z és $\mathbb{1}$ definíciójából látható, hogy ρ_Λ a következő $\mathbf{B}$-beli inhomogén lineáris egyenletet elégíti ki:

$$\rho_\Lambda = \mathbb{1} + \Pi_\Lambda K_z \rho_\Lambda$$

(5.15)-ből látható, hogy ha

$$z < \frac{1}{2}\frac{e^{-\beta(M-\varphi)}}{\exp\{e^{\beta M}-1\}-1} = c_1(\beta), \tag{5.18}$$

akkor

$$\|K_z\| < 1 \tag{5.19}$$

és következésképpen az $I - \Pi_\Lambda K_z$ operátor invertálható. Azaz

$$\rho_\Lambda = (I - \Pi_\Lambda K_z)^{-1}\,1\!\!1.$$

Ebben a kifejezésben végrehajthatjuk a $\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d$ limeszt és azt kapjuk, hogy (5.18) feltétel mellett

$$\rho = (I - K_z)^{-1}\,1\!\!1.$$

A jobb oldali

$$(I - K_z)^{-1} = \sum_{n=1}^{\infty} K_z^n$$

Neumann sorfejtés (5.19) miatt abszolút konvergens és $z \in [0, c_1(\beta))$-ban analitikus.

Könnyen belátható, hogy a

$$n_x \to 1 - n_x$$

ún. részecske-lyuk transzformációval egy ekvivalens rácsgáz modellt kapunk, azonos hőmérsékleten és

$$z' = \frac{e^{\beta\varphi}}{z} \tag{5.20}$$

fugacitással. (A részecske-lyuk transzformációnak a mágneses Ising-modell $\pm$ spin-tükrözési transzformációja felel meg.) A fenti érvelést erre végrehatva, majd az (5.20) transzformációt mégegyszer – visszafelé – végrehajtva azt láthatjuk, hogy a korrełációs függvények a

$$z > 2e^{\beta M}\left(\exp\{e^{\beta M}-1\}-1\right) = c_2(\beta) \tag{5.21}$$

tartományban is analitikus függvényei z-nek. $c_1(\beta)$ csökkenő, míg $c_2(\beta)$ növekvő függvénye β-nak, továbbá

$$c_1(0) = \infty = c_2(\infty), \qquad c_1(\infty) = 0 = c_2(0).$$

Következik, hogy létezik egy $\beta^* \in (0, \infty)$, úgy, hogy

$$\beta < \beta^* \quad \Rightarrow \quad c_2(\beta) < c_1(\beta). \tag{5.22}$$

Végül (5.18), (5.21) és (5.22) alapján arra következtetünk, hogy ha $\beta < \beta^*$ akkor $z \to \rho$ analitikus *az egész $z > 0$ fugacitás tartományban.* A $z \to \rho$ analitikusságából a $z \to p$ analitikussága is könnyen adódik, mivel a korreláció függvény értéke az egyelemű halmazon pontosan a nyomásnak a kémiai potenciál szerinti első deriváltja:

$$\rho(\{x\}) = \frac{1}{\beta}\frac{\partial p}{\partial \mu} = z\frac{\partial p}{\partial z}.$$

Beláttuk tehát a következő tételt:

17. Tétel (Kirkwood – Salsburg-sorfejtés konvergenciája és analitikusság, rácsgáz nyelven)**.** *Fix $\beta > 0$ mellett a*

$$\mu \in (-\infty, \ln c_1(\beta)) \cup (\ln c_2(\beta), \infty)$$

tartományban a $\mu \to p$ nyomás és a $\mu \to \rho$ korrelációs függvény a kémiai potenciál analitikus függvénye.

Ez (5.3)–(5.6) segítségével könnyen átfogalmazható a mágneses Ising-modellre. Legyen

$$c_3(\beta) = 2e^{\frac{\beta}{2}(M - \frac{\varphi}{2})}\left(\exp\{e^{\beta M} - 1\} - 1\right).$$

18. Tétel (Kirkwood – Salsburg-sorfejtés konvergenciája és analitikusság, mágneses nyelven)**.** *Fix $\beta > 0$ mellett a*

$$h \in (-\infty, -\ln c_3(\beta)) \cup (\ln c_3(\beta), \infty)$$

tartományban a $h \to p$ nyomás és az $h \to m$ korrelációs függvény a h külső mágneses tér analitikus függvénye.

A fejezethez tartozó irodalom: [13], [28].

6. fejezet

Analitikusság II: Lee és Yang tétele

6.1. Egy kis komplex függvénytan

Az alábbi két klasszikus komplex függvénytani tétel és bizonyításuk megtalálható például a [29] könyvében.

19. Tétel (Vitali tétele)**.** *Legyen $D \subset \mathbb{C}$ korlátos, egyszerűen összefüggő, nyilt tartomány olyan, hogy $D \cap \mathbb{R} \neq \emptyset$ és $f_n : D \to \mathbb{C}$, $n \in \mathbb{N}$, függvények teljesítsék az alábbi három feltételt*

(i) *analitikusak a D tartományon,*

(ii) *egyenletesen korlátosak D-n, azaz $(\exists M < \infty)$ úgy, hogy $\sup_{n\in\mathbb{N}} \sup_{z\in D} |f_n(z)| \leq M$,*

(iii)
$$(\forall x \in D \cap \mathbb{R}) : \quad \lim_{n\to\infty} f_n(x) = f(x).$$

Ekkor: f analitikusan kiterjeszthető $D \cap \mathbb{R}$-ről D-re és ha $\overline{D'} \subset D$, akkor $\overline{D'}$-en az f_n függvénysorozat egyenletesen konvergál f-hez, azaz

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{z\in\overline{D'}} |f_n(z) - f(z)| = 0.$$

20. Tétel (Hurwitz tétele). *Legyen $D \subset \mathbb{C}$ korlátos, nyílt tartomány, f_n, $n \in \mathbb{N}$ és $f \not\equiv 0$ analitikus függvények D-n értelmezve, úgy, hogy*

$$(\forall z \in D): \qquad f(z) = \lim_{n\to\infty} f_n(z).$$

Ha $z_0 \in D$ k-szoros multiplicitású zérushelye f-nek és U olyan környezete z_0-nak, amelyben f-nek z_0-n kívül más zérushelye nincsen, akkor létezik egy olyan $N \in \mathbb{N}$, hogy minden $n > N$-re f_n-nek, multiplicitásokat is figyelembe véve, pontosan k darab zérushelye van U-ban

6.2. Alkalmazás az Ising-modellre

A jól ismert párkölcsönhatásos Ising-modellt tekintjük $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$-n:

$$H_\Lambda(\underline{\sigma}) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j\in\Lambda} J_{i,j}\sigma_i\sigma_j - h\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i.$$

Vezessük be a

$$z = \exp\{\beta h\}$$

fugacitás változót és a továbbiakban függvényeinket *komplex $z \in \mathbb{C}\setminus\{0\}$-ra kiterjesztve* értelmezzük. Az állapotösszeg:

$$Z_\Lambda(\beta, z) = \sum_{\underline{\sigma}\in\Omega_\Lambda} z^{\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i}\exp\{\frac{\beta}{2}\sum_{i,j\in\Lambda} J_{i,j}\sigma_i\sigma_j\}.$$

Legyen $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ Van Hove értelemben és tekintsük (rögzített β paraméter mellett) az

$$f_n(z) = (Z_{\Lambda_n}(\beta, z))^{1/|\Lambda_n|} = \exp\{\beta p_{\Lambda_n}(\beta, \frac{\ln z}{\beta})\}$$

függvényeket. Ezekre a függvényekre próbáljuk meg a fenti tételeket alkalmazni.

Legyen $D \subset \mathbb{C}\setminus\{z : |z| \le \epsilon\}$ olyan tartomány, mint a Vitali-tételben. Ellenőrízzük az f_n függvénysorozatra a Vitali-tétel feltételeit:

(i) Véges Λ-ra

$$\mathbb{C}\setminus\{0\} \ni z \mapsto Z_\Lambda(\beta, z) \in \mathbb{C},$$

és következésképpen

$$D \ni z \mapsto f_n(z) \in \mathbb{C}$$

is, természetesen analitikus.

(ii) Az f_n függvények n-ben egyenletes korlátossága abból következik, hogy

$$|Z_\Lambda(\beta, z)| \leq \left(2 \max\{|z|, |z|^{-1}\} \exp\{\beta \sup_{i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} |J_{i,j}|\} \right)^{|\Lambda_n|}.$$

A fenti egyenlőtlenség jobb oldalán az exponens a stabilitási feltétel miatt véges.

(iii) f_n pontonkénti konvergenciája $D \cap \mathbb{R}$-en pedig nem egyéb, mint a termodinamikai limesz létezése valós z (valós h) esetén.

Vitali tétele alapján tehát következik, hogy az $f_n = \exp\{\beta p_{\Lambda_n}\}$ függvények a D tartományban konvergálnak egy *analitikus* f függvényhez, amely $\exp\{\beta p\}$ kiterjesztése valósról komplex z-kre.

Tegyük fel, hogy D olyan tartomány, amelyben, véges sok Λ kivételével, $Z_\Lambda(\beta, z)$-nek *nincsen zérushelye*, azaz $Z_\Lambda(\beta, z)$, $\Lambda \in \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$, zérushelyeinek *nincsen torlódási pontja D-ben.* Ekkor Hurwitz tétele alapján következik, hogy a fenti limesz f függvénynek sincsen zérushelye D-ben és következésképpen

$$D \ni z \mapsto \ln f(z) \in \mathbb{C}$$

is analitikus. Beláttuk tehát a következőt:

21. Állítás. *Legyen $T \subset \mathbb{C} \setminus \{0\}$ a $Z_\Lambda(\beta, z)$, $\Lambda \in \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$, zérushelyei torlódási pontjainak halmaza. Ekkor*

$$\big((\mathbb{C} \setminus \{0\}) \setminus T\big) \ni z \mapsto p(\beta, \frac{\ln z}{\beta}) \in \mathbb{C}$$

analitikus.

A fázisátmeneti paraméterek azonosításához tehát meg kell határoznunk az $T \subset \mathbb{C}$ halmazt.

6.3. Lee és Yang körtétele

22. Tétel (Lee és Yang körtétele)**.** *Legyen Λ véges halmaz és $\mathbf{A} = (A_{i,j})_{i,j\in\Lambda}$ valós szimmetrikus mátrix, amelynek mátrixelemei teljesítik a*

$$|A_{i,j}| \le 1$$

feltételt. A

$$P_{\mathbf{A}}(z) := \sum_{S\subset\Lambda} z^{|S|}\left\{\prod_{i\in S}\prod_{j\in\Lambda\setminus S} A_{i,j}\right\}$$

$|\Lambda|$-fokú komplex polinom zérushelyei a $\{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$ komplex egységkörön vannak.

Lee és Yang körtételének egyenes következménye az alábbi

23. Tétel. *Ferromágneses párkölcsönhatású Ising-modell esetén $(J_{i,j} \ge 0)$ minden rögzített $\beta \ge 0$ mellett $h \mapsto p(\beta, h)$ analitikus a $h \ne 0$ tartományban. Masképp szólva: fázisátmenet csak $h = 0$-ban lehetséges.*

Következmény bizonyítása:

$$\begin{aligned}
Z_\Lambda(\beta, z) &= \sum_{\underline{\sigma}\in\Omega_\Lambda} z^{\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i}\exp\{\frac{\beta}{2}\sum_{i,j\in\Lambda} J_{i,j}\sigma_i\sigma_j\} \\
&= \sum_{S\subset\Lambda} z^{2|S|-|\Lambda|}\exp\{\frac{\beta}{2}\sum_{i,j\in S} J_{i,j} + \frac{\beta}{2}\sum_{i,j\in\Lambda\setminus S} J_{i,j} - \beta\sum_{i\in S, j\in\Lambda\setminus S} J_{i,j}\} \\
&= z^{-\Lambda}\exp\{\frac{\beta}{2}\sum_{i,j\in\Lambda} J_{i,j}\}\sum_{S\subset\Lambda} z^{2|S|}\left\{\prod_{i\in S}\prod_{j\in\Lambda\setminus S} A_{i,j}\right\},
\end{aligned}$$

ahol

$$A_{i,j} = \exp\{-2\beta J_{i,j}\}.$$

Világos, hogy ferromágneses kölcsönhatás esetán a Lee – Yang-körtétel feltételei teljesülnek a

$$P_{\mathbf{A}}(z) = z^{|\Lambda|}\exp\{-\frac{\beta}{2}\sum_{i,j\in\Lambda} J_{i,j}\} Z_\Lambda(\beta, z)$$

polinomra és következésképp minden $\Lambda \in \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$-re és minden $\beta \geq 0$-ra $Z_\Lambda(\beta, z)$ zérushelyei a komplex egységkörön vannak. Ebből állításunk közvetlenül adódik. □

Lee – Yang-tétel bizonyítása: PÓTOLANDÓ

□

6.4. Konklúzió

A Kirkwood – Salsburg és a Lee – Yang-elméletből együttesen az adódik, hogy ferromágneses párkölcsönhatású Ising-modell fázisátmenetei csak a

$$h = 0, \qquad\qquad T \leq T^* < \infty$$

paraméterértékek mellett lehetségesek. A Kirkwood – Salsburg-ból kapott T^* természetesen nem optimális (nagyobb a valódi T_c-nél). (Ábra a táblán.)

A fejezethez kapcsolódó irodalom: [28], [13], [29], [19], [20].

7. fejezet

Fázisátmenet az Ising-modellben: Peierls módszere; Griffiths-egyenlőtlenségek és következményeik

7.1. A fázisátmenet Peierls-féle bizonyítása

Kétdimenziós modellel fogunk foglalkozni. Általánosítás magasabb dimenzióra magától adódik. Tekintsük a $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ tartományban az első szomszéd kölcsönhatású ferromágneses Ising-modellt h külső mágneses térrel és *szabad peremfeltétellel*:

$$H_{\Lambda}(\underline{\sigma}) = -\frac{J}{2} \sum_{\substack{|x-y|=1 \\ x,y \in \Lambda}} \sigma_x \sigma_y - h \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x. \tag{7.1}$$

Világos, hogy a nyomás páros, a mágnesezettség pedig páratlan függvénye h-nak:

$$\begin{aligned} p_\Lambda(\beta, -h) &= p_\Lambda(\beta, h), \\ m_\Lambda(\beta, -h) &= -m_\Lambda(\beta, h). \end{aligned}$$

Ezek a tulajdonságok természetesen a termodinamikai limeszben is öröklődnek.

Célunk a következő tétel belátása:

24. Tétel (Rudolf Peierls tétele)**.** *Tekintsük a fenti Ising-modellt $d \geq 2$-ben. Létezik $\beta_c < \infty$ ($T_c > 0$), úgy, hogy rögzített $\beta > \beta_c$ ($T < T_c$) mellett*

$$\lim_{h \searrow 0} m(\beta, h) = \lim_{h \searrow 0} \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^2} m_\Lambda(\beta, h) = m(\beta, +0) > 0, \tag{7.2}$$

ami $h \mapsto m(\beta, h)$ páratlan volta miatt pontosan az elsőrendű fázisátmenetet jelenti.

Peierls tételének bizonyítása. A (7.1)-ben szabad peremfeltétellel definiált Hamilton-függvény mellett értelmezzük $\tilde{H}_\Lambda$-t $+$*peremfeltétellel*:

$$\tilde{H}_\Lambda(\underline{\sigma}) = H_\Lambda(\underline{\sigma}) - J \sum_{x \in \partial^- \Lambda} \sigma_x,$$

ahol $\partial^- \Lambda$ a Λ tartomány belső határa:

$$\partial^- \Lambda = \{x \in \Lambda : \mathrm{dist}(x, \Lambda^c) = 1\}.$$

$\tilde{p}_\Lambda, \tilde{m}_\Lambda$-val jelöljük a $\tilde{H}_\Lambda$-nak megfelelő termodinamikai mennyiségeket. A termodinamikai limesz létezésének bizonyításakor láttuk, hogy a limesz mennyiségek nem függenek a peremfeltételtől:

$$\begin{aligned} \lim_{\Lambda \nearrow Z^2} p_\Lambda(\beta, h) &= p(\beta, h) = \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^2} \tilde{p}_\Lambda(\beta, h), \\ \lim_{\Lambda \nearrow Z^2} m_\Lambda(\beta, h) &= m(\beta, h) = \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^2} \tilde{m}_\Lambda(\beta, h). \end{aligned} \tag{7.3}$$

(7.2) bizonyítása a következő három lépésből fog állni:

1. (ez lesz a lényeg!) Belátjuk, hogy elég alacsony hőmérsékleten (azaz elég nagy β mellett)
$$\tilde{m}_\Lambda(\beta, 0) \geq \alpha > 0 \tag{7.4}$$
Λ-ban egyenletesen — azaz a pozitív α konstans csak β-tól függ, Λ-tól nem.

2. $h \mapsto \tilde{p}_\Lambda \beta, h)$ konvexitása miatt (ezt már beláttuk!) (7.4)-ből következik, hogy $h \geq 0$-ra
$$\tilde{p}_\Lambda(\beta, h) \geq \tilde{p}_\Lambda(\beta, 0) + \alpha h.$$

3. A fenti egyenlőtlenség természetesen a termodinamikai limeszben is öröklődik, tehát (7.3)-at használva

$$p(\beta, h) \geq p(\beta, 0) + \alpha h.$$

Ebből pedig — p konvexitását megint használva — egyenesen adódik (7.2).

A második és harmadik lépés triviális, tehát hátra van még (7.4) bizonyítása.

$\underline{\sigma} \in \Omega_\Lambda$ egy-egyértelműen azonosítható egy $\Lambda = \Lambda_+(\underline{\sigma}) \cup \Lambda_-(\underline{\sigma})$ felosztással a következő módon:

$$\Lambda_+(\underline{\sigma}) = \{x \in \Lambda : \sigma_x = +1\}, \qquad \Lambda_-(\underline{\sigma}) = \{x \in \Lambda : \sigma_x = -1\}.$$

Természetesen

$$\begin{aligned} |\Lambda_+(\underline{\sigma})| + |\Lambda_-(\underline{\sigma})| &= |\Lambda|\,, \\ |\Lambda_+(\underline{\sigma})| - |\Lambda_-(\underline{\sigma})| &= \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x. \end{aligned} \tag{7.5}$$

E két azonosságból adódik, hogy

$$\tilde{m}_\Lambda(\beta, 0) = \frac{\langle |\Lambda_+| - |\Lambda_-| \rangle_0^{\sim}}{|\Lambda|} = 1 - 2\frac{\langle |\Lambda_-| \rangle_0^{\sim}}{|\Lambda|},$$

ahol $\langle \ldots \rangle_0^{\sim}$ a +-peremfeltétellel és $h = 0$ külső mágneses térrel értelmezett Gibbs-eloszlás szerinti átlagolást jelenti.

Nevezzük *elemi kontúrnak* a $\mathbb{Z}^2 + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ (Whitney-féle) duális rácsnak egy egyszerű körét, ami ugyanaz, mint a $\mathbb{Z}^2$ rács éleinek egy olyan véges részhalmaza amely a rácsot két diszjunkt (egy véges és egy végtelen) összefüggő részre osztja. A továbbiakban jelöljük $|\gamma|$-val a γ kontúr hosszát. Legyen Γ_Λ a $\overline{\Lambda} = \Lambda \cup \partial^+\Lambda$-n belüli kontúrok halmaza. ($\partial^+\Lambda$ a Λ tartomány külső határa.)

$\underline{\sigma} \in \Omega_\Lambda$ (vagy $\Lambda_\pm$) egy-egyértelműen azonosítható egymást át nem metsző Γ_Λ-beli kontúroknak halmazával is. Adott $\gamma \in \Gamma_\Lambda$ mellett legyen

$$\chi_\gamma(\underline{\sigma}) = \begin{cases} 1 & \text{ha } \gamma \text{ jelen van } \underline{\sigma} \text{ kontúrjai között} \\ 0 & \text{ha } \gamma \text{ nincs jelen } \underline{\sigma} \text{ kontúrjai között} \end{cases}$$

A legkézenfekvőbb izoperimetrikus egyenlőtlenség felhasználásával adódik, hogy

$$|\Lambda_-(\underline{\sigma})| \le \sum_{\gamma\in\Gamma_\Lambda} \left(\frac{|\gamma|}{4}\right)^2 \chi_\gamma(\underline{\sigma}).$$

És ebből természetesen

$$\langle|\Lambda_-(\underline{\sigma})|\rangle_0^\sim \le \sum_{\gamma\in\Gamma_\Lambda} \left(\frac{|\gamma|}{4}\right)^2 \langle\chi_\gamma(\underline{\sigma})\rangle_0^\sim , \tag{7.6}$$

ahol

$$\langle\chi_\gamma(\underline{\sigma})\rangle_0^\sim = \frac{\sum_{\underline{\sigma}\in\Omega_\Lambda} \chi_\gamma(\underline{\sigma}) \exp\{-\beta\tilde{H}_\Lambda(\underline{\sigma})\}}{\sum_{\underline{\sigma}\in\Omega_\Lambda} \exp\{-\beta\tilde{H}_\Lambda(\underline{\sigma})\}}. \tag{7.7}$$

Adott $\gamma \in \Gamma_\Lambda$ mellett legyen

$$\begin{aligned} \Delta_{\Lambda,\gamma} &= \{\underline{\sigma} \in \Omega_\Lambda : \gamma \text{ jelen van } \underline{\sigma} \text{ kontúrjai között } \} \\ \Delta^*_{\Lambda,\gamma} &= \{\underline{\sigma} \in \Omega_\Lambda : \underline{\sigma} \text{ kontúrjai éldiszjunktak } \gamma\text{-tól } \} \end{aligned}$$

és

$$R_\gamma : \Omega_\Lambda \to \Omega_\Lambda, \qquad (R_\gamma\underline{\sigma})_x = \begin{cases} -\sigma_x & \text{ha } \gamma \text{ körüljárja } x\text{-et} \\ \sigma_x & \text{ha } \gamma \text{ nem járja körül } x\text{-et} \end{cases}$$

Azaz R_γ a γ által határolt területen belüli spineket megfordítja, a többieket érintetlenül hagyja. Vegyük észre, hogy R_γ bijekciót létesít $\Delta_{\Lambda,\gamma}$ és $\Delta^*_{\Lambda,\gamma}$ között és

$$\underline{\sigma} \in \Delta_{\Lambda,\gamma}\text{-ra} \qquad \tilde{H}_\Lambda(\underline{\sigma}) = \tilde{H}_\Lambda(R_\gamma\underline{\sigma}) + 2J\,|\gamma|\,.$$

Ezt felhasználva, (7.7)-ből azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \langle\chi_\gamma(\underline{\sigma})\rangle_0^\sim &= \frac{\sum_{\underline{\sigma}\in\Delta_{\Lambda,\gamma}} \exp\{-\beta\tilde{H}_\Lambda(\underline{\sigma})\}}{\sum_{\underline{\sigma}\in\Omega_\Lambda} \exp\{-\beta\tilde{H}_\Lambda(\underline{\sigma})\}} \\ &\le \frac{\sum_{\underline{\sigma}\in\Delta_{\Lambda,\gamma}} \exp\{-\beta\tilde{H}_\Lambda(\underline{\sigma})\}}{\sum_{\underline{\sigma}\in\Delta^*_{\Lambda,\gamma}} \exp\{-\beta\tilde{H}_\Lambda(\underline{\sigma})\}} \\ &= e^{-2\beta J|\gamma|} \end{aligned}$$

Ezt behelyettesítve (7.6)-ba azt kapjuk, hogy

$$\langle|\Lambda_-(\underline{\sigma})|\rangle_0^\sim \le \sum_{\gamma\in\Gamma_\Lambda} \left(\frac{|\gamma|}{4}\right)^2 e^{-2\beta J|\gamma|} = \sum_{r\ge0} \nu_\Lambda(r) \left(\frac{r}{4}\right)^2 e^{-2\beta Jr}, \tag{7.8}$$

ahol $\nu_\Lambda(r)$ az r hosszú kontúrok száma Λ-ban

$$\nu_\Lambda(r) = |\{\gamma \in \Gamma_\Lambda : |\gamma| = r\}| .$$

Elemi leszámolásból könnyen adódik a következő felső becslés $\nu_\Lambda(r)$-re:

$$\nu_\Lambda(r) \leq \begin{cases} 0 & \text{ha} \quad r \quad \text{páratlan} \\ |\Lambda| \cdot 4 \cdot 3^{r-1} & \text{ha} \quad r \quad \text{páros} \end{cases}$$

Végül ezt a becslést használva (7.8)-ból azt kapjuk, hogy

$$\frac{\langle |\Lambda_-(\underline{\sigma})| \rangle_0^\sim}{|\Lambda|} \leq \frac{1}{3} \sum_{k=0}^{\infty} k^2 \exp\{2(\log 3 - 2\beta J)k\},$$

ami tetszőlegesen kicsi, ha β elég nagy. Ebből és (7.5)-ből következik, hogy $\tilde{m}_\Lambda(\beta, 0)$ tetszőlegesen közel lehet 1-hez elég nagy β mellett — Λ-ban egyenletesen. □

7.2. Griffiths – Kelly – Sherman-féle korrelációs egyenlőtlenségek

Legyen Λ véges halmaz és tekintsünk rajta egy *általános* (tehát nem feltétlenül pár-) kölcsönhatásos Ising-modellt. Azaz legyen

$$\mathcal{P}(\Lambda) \ni A \mapsto J_A \in \mathbb{R}.$$

A Hamilton-függvény

$$H_\Lambda(\underline{\sigma}) = -\sum_{A \in \mathcal{P}(\Lambda)} J_A \sigma_A,$$

ahol

$$\sigma_A = \prod_{i \in A} \sigma_i.$$

A Λ, β, J_A paramétereket rögzítve tartjuk és az ezektől való függést e részen belül nem jelöljük. A következő tételt fogjuk belátni:

25. Tétel (GKS-egyenlőtlenségek)**.** *Ha a kölcsönhatás ferromágneses, azaz* $\forall A \in \mathcal{P}(\Lambda) : J_A \geq 0$*, akkor a következő egyenlőtlenségek teljesülnek:*

$$GKSI: \qquad (\forall B \subset \Lambda): \qquad \langle \sigma_B \rangle \geq 0, \tag{7.9}$$

$$GKSII: \qquad (\forall B, C \subset \Lambda): \qquad \langle \sigma_B \sigma_C \rangle - \langle \sigma_B \rangle \langle \sigma_C \rangle \geq 0. \tag{7.10}$$

Azt már régen tudjuk, hogy

$$\begin{aligned}\langle\sigma_B\rangle =& \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial J_B},\\ \langle\sigma_B\sigma_C\rangle - \langle\sigma_B\rangle\langle\sigma_C\rangle =& \frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial J_B \partial J_C} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial\langle\sigma_B\rangle}{\partial J_C} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial\langle\sigma_C\rangle}{\partial J_B}.\end{aligned}$$

$M_{A,B} = \langle\sigma_B\sigma_C\rangle - \langle\sigma_B\rangle\langle\sigma_C\rangle =$ kovariancia mátrix és ebből következik természetesen, hogy *pozitív definit*. A (7.10) egyenlőtlenség a mátrixelemek egyenkénti pozitív voltát állítja, ami a pozitív definitségtől logikailag teljesen független.

A tétel tehát azt állítja, hogy ferromágneses kölcsönhatás esetén a σ_A, $A \subset \Lambda$ valószínűségi változók várhatóértékei és korrelációi egyaránt nem-negatívak. (7.10)-ből az is következik, hogy a $\langle\sigma_B\rangle$ várhatóértékek a J_C ferromágneses kölcsönhatási együtthatóknak monoton növekvő függvényei.

GKS-egyenlőtlenségek bizonyítása: $\underline{\sigma} \in \Omega_\Lambda$ spinkonfigurációk egy-egyértelműen azonosíthatók $E \in \mathcal{P}(\Lambda)$ részhalmazokkal a következő módon:

$$\sigma_i = 1 - 2\chi_E(i), \qquad E = \{i \in \Lambda : \sigma_i = -1\}.$$

Ebben a reprezentációban a σ_B spinszorzatok a következő függvények

$$\sigma_B : \mathcal{P}(\Lambda) \to \{-1, 1\}, \qquad \sigma_B(E) := (-1)^{|B\cap E|}.$$

$\mathcal{P}(\Lambda)$ kommutatív csoportot képez a

$$AB = (A \cup B) \setminus (A \cap B)$$

szimmetrikus differenciával, mint szorzással. A csoport semleges eleme az $\emptyset$ üres halmaz és minden elem önmaga inverze $B^{-1} = B$. Könnyű ellenőrizni, hogy a σ_B függvények eleget tesznek a következő azonosságoknak: $(\forall B, C, E \in \mathcal{P}(\Lambda))$:

$$\begin{aligned}\sigma_B(E) &= \sigma_E(B),\\ \sigma_{BC}(E) &= \sigma_B(E)\sigma_C(E), \qquad (7.11)\\ \sigma_E(BC) &= \sigma_E(B)\sigma_E(C). \qquad (7.12)\end{aligned}$$

(7.9) *bizonyítása:* Ebben a reprezentációban

$$
\begin{aligned}
Z\langle\sigma_B\rangle &\overset{1}{=} \sum_{E\subset\Lambda}\sigma_B(E)\exp\{\beta\sum_{A\subset\Lambda}J_A\sigma_A(E)\} \qquad (7.13)\\
&\overset{2}{=} \sum_{E\subset\Lambda}\sigma_B(E)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\beta^n}{n!}\sum_{A_1,A_2,\dots,A_n\subset\Lambda}J_{A_1}\sigma_{A_1}(E)J_{A_2}\sigma_{A_2}(E)\dots J_{A_n}\sigma_{A_n}(E)\\
&\overset{3}{=} \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\beta^n}{n!}\sum_{A_1,A_2,\dots,A_n\subset\Lambda}J_{A_1}J_{A_2}\dots J_{A_n}\sum_{E\subset\Lambda}\sigma_B(E)\sigma_{A_1}(E)\sigma_{A_2}(E)\dots\sigma_{A_n}(E)
\end{aligned}
$$

Az első lépésben $\langle\sigma_B\rangle$ definícióját használtuk, a második lépésben az exponenciálist sorba fejtettük, a harmadikban pedig az összegzések sorrendjét cseréltük fel (konvergencia problémák nincsenek). De (7.11)-et használva

$$
\begin{aligned}
\sum_{E\subset\Lambda}\sigma_B(E)\sigma_{A_1}(E)\sigma_{A_2}(E)\dots\sigma_{A_n}(E) &= \sum_{E\subset\Lambda}\sigma_{BA_1A_2\dots A_n}(E)\\
&= \begin{cases} 2^{|\Lambda|} & \text{ha} \quad B = A_1A_2\dots A_n\\ 0 & \text{ha} \quad B \neq A_1A_2\dots A_n\end{cases}
\end{aligned}
$$

Ezt a kifejezés behelyezve (7.13) jobb oldalára azt láthatjuk, hogy ferromágneses kölcsönhatás esetén $Z\langle\sigma_B\rangle$ nem-negatív tagok összegeként állítható elő, ami bizonyítja az első (7.9)-et.

5. Megjegyzés. *A fenti bizonyításból az is látszik, hogy ha $B = A_1A_2\dots A_n$ olyan $A_1,\dots,A_n$-ekkel amelyekhez tartozó J_{A_i} kölcsönhatási együtthatók pozitívak, akkor $\langle\sigma_B\rangle > 0$. (Ez a megjegyzés pótolja a hiányzó láncszemet a Lee – Yang-tétel bizonyításában.)*

(7.10) *bizonyítása:*

$$
\begin{aligned}
&Z^2\big(\langle \sigma_B \sigma_C \rangle - \langle \sigma_B \rangle \langle \sigma_C \rangle \big) \qquad (7.14)\\
&\stackrel{1}{=} \sum_{E\in\Lambda} \exp\{\beta \sum_{A\in\Lambda} J_A \sigma_A(E)\} \sum_{F\in\Lambda} \sigma_B(F)\sigma_C(F) \exp\{\beta \sum_{A\in\Lambda} J_A \sigma_A(F)\} -\\
&\quad - \sum_{E\in\Lambda} \sigma_B(E) \exp\{\beta \sum_{A\in\Lambda} J_A \sigma_A(E)\} \sum_{F\in\Lambda} \sigma_C(F) \exp\{\beta \sum_{A\in\Lambda} J_A \sigma_A(F)\}\\
&\stackrel{2}{=} \sum_{E\in\Lambda} \sum_{F\in\Lambda} (\sigma_{BC}(F) - \sigma_B(E)\sigma_C(F)) \exp\{\beta \sum_{A\in\Lambda} J_A\left(\sigma_A(E) + \sigma_A(F)\right)\}\\
&\stackrel{3}{=} \sum_{E\in\Lambda} \sum_{F\in\Lambda} (1 - \sigma_B(EF))\, \sigma_{BC}(F) \exp\{\beta \sum_{A\in\Lambda} J_A\left(1 + \sigma_A(EF)\right) \sigma_A(E)\}\\
&\stackrel{4}{=} \sum_{G\in\Lambda} (1 - \sigma_B(G)) \sum_{F\in\Lambda} \sigma_{BC}(F) \exp\{\beta \sum_{A\in\Lambda} J_A\left(1 + \sigma_A(G)\right) \sigma_A(F)\}
\end{aligned}
$$

Az első lépésben $\langle \sigma_B \sigma_C \rangle - \langle \sigma_B \rangle \langle \sigma_C \rangle$ definícióját használtuk. A második lépésben az összeget egyszerűen átrendeztük. A harmadik lépésben a (7.11) és (7.12) azonosságokat használtuk ki. Végül a negyedik lépésben — kihasználva, hogy $\mathcal{P}(\Lambda)$ csoport a szimmetrikus differenciával, mint szorzással — a $G = EF$ összegzési változót vezettük be.

Rögzített G mellett legyen

$$\tilde{J}_A = J_A\left(1 + \sigma_A(G)\right)$$

Világos, hogy

$$\tilde{J}_A \geq 0$$

és a (7.14) jobb oldalán lévő belső összeg (7.9) alapján nem-negatív:

$$\sum_{F\in\Lambda} \sigma_{BC}(F) \exp\{\beta \sum_{A\in\Lambda} \tilde{J}_A \sigma_A(F)\} \geq 0$$

Mivel $1 - \sigma_B(G)$ szintén nem-negatív, (7.14) jobb oldalán a G szerinti összeg minden tagja nem-negatív. Ezzel (7.10)-et is beláttuk.

□

7.3. A GKS egyenlőtlenségek néhány alkalmazása

1. (7.9) bizonyításának végén tett megjegyzésünknek megfelelően ezt használjuk a Lee–Yang-tétel bizonyításának egy lépésében.

2. Peierls bizonyításából és (7.10)-ből adódik *fázisátmenet bizonyítása* az olyan eltolásinvariáns ferromágneses Ising-modellekre $\mathbb{Z}^d$-n, amelyekre $J_A = 0$ ha $|A|$ páratlan és $J_A \geq c > 0$ ha $A = \{x, y\}$, $|x - y| = 1$.

3. A Dyson-féle hierarchikus modellre vonatkozó eredményekből és (7.10)-ből következik fázisátmenet egydimenziós *hosszú távú párkölcsönhatású* Ising-modellre: $J_{x,y} \sim (x - y)^{-2}$.

4. Korrelációs függvények létezése a termodinamikai limeszben (monotonicitás útján) a Kirkwood – Salsburg-féle konvergencia tartományon kívül is.

A fejezethez kapcsolódó irodalom: [28], [13], [24], [10], [11], [12], [14].

8. fejezet

A klasszikus Heisenberg-modell: tükrözési pozitivitás és infravörös korlátok

8.1. Folytonos szimmetriájú modellek

Legyen

$$S^{\nu-1} = \{\vec{v} = (v_1, \dots, v_\nu) \in \mathbb{R}^\nu : v_1^2 + \dots + v_\nu^2 = 1\}$$

a ν dimenziós egységgömb (felület) és tekintsünk egy olyan rács spin-modellt, amelynek egyes spinjei $S^{\nu-1}$ elemei. Azaz az állapottér:

$$\Omega_\Lambda = \left(S^{\nu-1}\right)^\Lambda = \{\underline{\vec{\sigma}} = \left(\vec{\sigma}(x)\right)_{x\in\Lambda} : \vec{\sigma}(x) \in S^{\nu-1}\}.$$

Az Ω_Λ állapottéren a

$$\prod_{x\in\Lambda} d\vec{\sigma}(x)$$

empha priori mértéket tekintjük, ahol $d\vec{\sigma}(x)$ az $x \in \Lambda$ rácspont feletti $S^{\nu-1}$ gömbfelületen a Haar-mérték. A modell Hamilton-függvénye:

$$H_\Lambda(\underline{\vec{\sigma}}) = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{|x-y|=1 \\ x,y\in\Lambda}} \vec{\sigma}(x) \cdot \vec{\sigma}(y), \tag{8.1}$$

ahol $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ téglatest alakú részhalmaz és *periodikus peremfeltételeket* tekintünk. (Ennek elsősorban kényelmi okai vannak.) Az egyensúlyi Gibbs-eloszlás Ω_Λ-n:

$$d\mu_\Lambda(\underline{\vec{\sigma}}) = \frac{1}{Z_\Lambda} \exp\{-\beta H_\Lambda(\underline{\vec{\sigma}})\} \prod_{x\in\Lambda} d\vec{\sigma}(x). \tag{8.2}$$

$\nu = 1$ esetben ez pontosan a már jól ismert Ising-modell: a Hamilton-függvénynek és a Gibbs-mértéknek globális $\mathbb{Z}_2$ belső szimmetriája van (spin-tükrözés), ami $d \geq 2$-ben alacsony hőmérdékleten a termodinamikai limeszben spontán módon sérül' — első rendű fázisátmenetet mutat. Ennek oka (és bizonyítási módja) a Peierls-jelenség: a kontúrok jól definiáltak és egy kontúr energiája a hosszával arányos.

A $\nu \geq 2$ esetek a fentitől *lényegesen eltérnek.* Ekkor a globális belső szimmetria $O(\nu)$, a ν dimenziós tér forgatáscsoportja. Ez $\nu \geq 2$ esetekben nem diszkrét, hanem folytonos csoport. Kérdés: ez tud-e sérülni, mely dimenziókban? Világos, hogy a Peierls érv itt nem alkalmazható (pontosabban: meg sem fogalmazható értelmesen).

Szóhasználat: $\nu = 1$: Ising-modell; $\nu = 2$: sík rotátor; $\nu = 3$: klasszikus Heisenberg-modell.

8.2. A hosszú távú rend paraméter

Husszú távú rend paraméternek (long range order parameter) az

$$r(\beta) = \lim_{\Lambda\nearrow\mathbb{Z}^d} \left\langle \left(\frac{\sum_{x\in\Lambda} \vec{\sigma}(x)}{|\Lambda|} \right)^2 \right\rangle_\Lambda = \lim_{\Lambda\nearrow\mathbb{Z}^d} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x\in\Lambda} \langle \vec{\sigma}(0)\vec{\sigma}(x)\rangle_\Lambda$$

mennyiséget nevezzük. A második egyenlőségben a

$$\langle \vec{\sigma}(x)\vec{\sigma}(y)\rangle_\Lambda = \langle \vec{\sigma}(0)\vec{\sigma}(y-x)\rangle_\Lambda$$

eltolásinvarianciát használjuk, ami a periodikus peremfeltétel következménye (Λ diszkrét tórusz). Azt mondjuk, hogy a modellben van (ill. nincs) hosszú távú rend (LRO), ha $r > 0$ (ill. ha $r = 0$). A LRO valószínűségszámítási jelentése világos: a globális belső szimmetria következtében $\langle \vec{\sigma}(x)\rangle_\Lambda = 0$, de LRO megjelenése esetén az $\vec{M} = \sum_{x\in\Lambda} \vec{\sigma}(x)$ teljes mágnesezettségnek $|\Lambda|$ nagyságrendű makroszkopikus fluktuációi vannak. Tehát a nagy számok törvénye sérül. Ez a spontán szimmetria törés az első rendű fázisátmenet megnyilvánulása, abban az értelemben is, hogy a nyomás nem analitikus $\vec{h} = \vec{0}$-ban:

26. Tétel (R. Griffiths tétele). *Ha $r(\beta) > 0$ akkor $\mathbb{R}^\nu \ni \vec{h} \mapsto p(\beta, \vec{h}) \in \mathbb{R}$ $\vec{h}$ szerinti első parciális deriváltjai nem folytonosak $\vec{h} = \vec{0} \in \mathbb{R}^\nu$-ban.*

6. Megjegyzés. *A nyomás most $\vec{h} \in \mathbb{R}^\nu$-nak forgásszimmetrikus függvénye. E tételt esetleg később bizonyítjuk, ha marad rá időnk. Nem nehéz.*

8.3. Eredmények

A negatív eredmény

27. Tétel (Mermin – Wagner-tétel (1967)). *Ha $\nu \geq 2$, azaz a modellnek folytonos belső szimmetriája van, akkor egy és két dimenzióban bármely véges β mellett (azaz bármely pozitív hőmérsékleten) $r(\beta) = 0$, nincsen LRO.*

7. Megjegyzés. *Emlékezzünk: az Ising-modell diszkrét belső szimmetriája már két dimenzióban is sérült alacsony hőmérsékleten. Itt tehát lényeges fizikai különbség van. (Fenomenologikus magyarázat a táblán.) Másfajta, hosszú távú renddel nem járó fázisátmenet elképzelhető (ún. Kosterlitz – Thouless-jelenség – magyarázat a táblánál), de ennek a matematikáját még nem értjük. A Mermin – Wagner-tételt később, kvantum-kontextusban fogjuk bizonyítani.*

A pozitív eredmény

28. Tétel (Fröhlich – Simon – Spencer-tétel (1976)). *Három és magasabb dimenzióban minden ν-re létezik $\beta_c < \infty$ ($T_c > 0$), úgy, hogy $\beta > \beta_c$ ($T < T_c$) mellett $r(\beta) > 0$, van LRO.*

8. Megjegyzés. *A következő előadásokon e tételt fogjuk bizonyítani. A bizonyítás módszere — az ún.* infravörös korlátok, Gauss-dominancia és tükrözési pozitivitás *(infrared bounds, Gaussian domination, reflection positivity) — nagyon erős, tanulságos, szerteágazó alkalmazási lehetőségekkel.*

8.4. Fourier-transzformáció a diszkrét tóruszon, jelölések, konvenciók

Legyen

$$\Lambda = \{x = (x_1, \dots, x_d) : x_i \in (-L_i/2, L_i/2] \cap \mathbb{Z},\ i = 1, \dots, d\}$$

a d dimenziós diszkrét tórusz $L_1, \dots, L_d \in \mathbb{N}$ oldalhosszakkal. Később fel fogjuk tenni, hogy az L_i oldalhosszak páros számok. $l^2(\Lambda)$ a Λ-n értelmezett komplex értékű függvények euklideszi tere a természetes

$$(f, g) = \sum_{x \in \Lambda} \overline{f(x)} g(x)$$

skaláris szorzattal. Λ duális tórusza

$$\Lambda^* = \left\{p = (p_1, \dots, p_d) : p_i = 2\pi \frac{k_i}{L_i},\ k_i \in (-L_i/2, L_i/2] \cap \mathbb{Z},\ i = 1, \dots, d\right\}$$
$$\subset [-\pi, \pi]^d$$

$l^2(\Lambda^*)$ a Λ^*-on értelmezett komplex értékű függvények Euklideszi tere a

$$(f, g)_* = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{p \in \Lambda^*} \overline{f(p)} g(p)$$

belső szorzattal. A direkt- és inverz Fourier transzformáció:

$$l^2(\Lambda) \ni f \mapsto \hat{f} \in l^2(\Lambda^*) : \qquad \hat{f}(p) := \sum_{x \in \Lambda} e^{ip \cdot x} f(x),$$
$$l^2(\Lambda^*) \ni f \mapsto \check{f} \in l^2(\Lambda) : \qquad \check{f}(x) := \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{p \in \Lambda^*} e^{-ip \cdot x} f(p),$$

ahol

$$p \cdot x = \sum_{i=1}^{d} p_i x_i.$$

Könnyű ellenőrízni, hogy e két transzformáció unitér:

$$f, g \in l^2(\Lambda) : \qquad \check{\hat{f}} = f, \qquad (\hat{f}, \hat{g})_* = (f, g),$$
$$f, g \in l^2(\Lambda^*) : \qquad \hat{\check{f}} = f, \qquad (\check{f}, \check{g}) = (f, g)_*.$$

A Fourier transzformációt (általában) azért szeretjük, mert az eltolásinvariáns operátorokat diagonalizálja. Pontosabban, ha

$$\mathbf{A} = (A_{x,y})_{x,y \in \Lambda}$$

egy olyan mátrix, amelynek mátrixelemei csak az $x-y$ különbségtől függenek (periodikus peremfeltételekkel)

$$A_{x,y} = a(x-y)$$

akkor

$$\widehat{[\mathbf{A}f]}(p) = \hat{a}(p)\hat{f}(p).$$

Egy nevezetes operátor: a diszkrét Laplace operátor

$$\Delta = (\Delta_{x,y})_{x,y\in\Lambda}\,, \qquad \Delta_{x,y} = \begin{cases} -2d & \text{ha} \quad |x-y| = 0 \\ 1 & \text{ha} \quad |x-y| = 1 \\ 0 & \text{ha} \quad |x-y| > 1 \end{cases}$$

$-\Delta$ pozitív szemidefinit; a Fourier transzformáltja:

$$D(p) = 2\sum_{i=1}^{d}(1-\cos p_i).$$

A Fourier transzformáció alaptulajdonságait, azonosságait stb. ismertnek feltételezzük és állandóan használni fogjuk.

8.5. A Fröhlich – Simon – Spencer bizonyítás főbb stációi

Bevezetjük a spin-spin pár korreláció függvényt:

$$c_{i,j}(x) = c^{\Lambda}_{i,j}(x) = \langle\vec{\sigma}_i(0)\vec{\sigma}_j(x)\rangle_{\Lambda} = \langle\vec{\sigma}_i(y)\vec{\sigma}_j(y+x)\rangle_{\Lambda}\,. \tag{8.3}$$

Mivel az alább következő bizonyításban szereplő azonosságok, becslések stb. Λ-tól függetlenek (ill. Λ-ban egyenletesek), a jelölések egyszerűsítése végett a Λ-tól való függést nem fogjuk explicit módon jelölni.

A (8.3)-ban definiált korreláció függvények Fourier transzformáltjai:

$$\hat{c}_{i,j}(p) = \sum_{x\in\Lambda} e^{ip\cdot x}c_{i,j}(x).$$

(A) *Infravörös korlát (IRB)* a korreláció függvényekre – ez lesz a bizonyítás lényege. Be fogjuk látni, hogy minden Λ-ra és minden $\Lambda^* \ni p \neq 0$-ra a

$$\left(\frac{1}{\beta D(p)}\delta_{i,j} - \hat{c}_{i,j}(p)\right)_{i,j=1}^{\nu}$$

mátrix pozitív szemidefinit. Ez egy borzasztó általános korlát: a modell mikro-részleteitől szinte teljesen független.

(B) *Egy egyszerű azonosság*:

$$1 = \langle \vec{\sigma}(0) \cdot \vec{\sigma}(0) \rangle_\Lambda = \sum_{i=1}^{\nu} c_{i,i}(0) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{p \in \Lambda^*} \sum_{i=1}^{\nu} \hat{c}_{i,i}(p)$$
$$= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i=1}^{\nu} \hat{c}_{i,i}(0) + \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{p \neq 0 \\ p \in \Lambda^*}} \sum_{i=1}^{\nu} \hat{c}_{i,i}(p).$$

(C) *Konklúzió*: (A)-ból és (B)-ből következik, hogy

$$1 \leq \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i=1}^{\nu} \hat{c}_{i,i}(0) + \frac{\nu}{\beta} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{p \neq 0 \\ p \in \Lambda^*}} \frac{1}{D(p)}. \tag{8.4}$$

Vegyük észre, hogy

$$\hat{c}_{i,j}(0) = \sum_{x \in \Lambda} \langle \sigma_i(0) \cdot \sigma_j(x) \rangle_\Lambda .$$

Tehát (8.4) ugyanaz mint

$$\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} \langle \sigma_i(0) \cdot \sigma_j(x) \rangle_\Lambda \geq 1 - \frac{\nu}{\beta} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{p \neq 0 \\ p \in \Lambda^*}} \frac{1}{D(p)}.$$

A jobb oldali második tag egy Riemann-összeg és világos, hogy

$$\lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{p \neq 0 \\ p \in \Lambda^*}} \frac{1}{D(p)} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{[-\pi,\pi]^d} \frac{1}{D(p)} dp =: I_d. \tag{8.5}$$

Mivel $1/D(p)$ egyetlen szingularitása a $p = 0$ pontban van és

$$D(p) = dp^2 + O(p^4), \qquad |p| \to 0,$$

a (8.5) jobb oldalán lévő integrál egy és két dimenzióban divergens, de három- és annál magasabb dimenzióban véges. Mindezt összegezve, azt kapjuk, hogy három és magasabb dimenzióban

$$r(\beta) \geq 1 - \frac{\nu}{\beta} I_d,$$

ami elég nagy β-ra (elég kis hőmérsékleten) pozitív, sőt 1-hez (azaz telítettséghez) tart, amint $\beta \to \infty$ $(T \to 0)$.

8.6. Az infravörös korlát bizonyítása

A (8.1) Hamilton-függvény következő ekvivalens alakjait fogjuk használni (mikor melyik kényelmesebb):

$$\begin{aligned} H_\Lambda(\underline{\vec{\sigma}}) &= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{|x-y|=1 \\ x,y \in \Lambda}} \vec{\sigma}(x) \cdot \vec{\sigma}(y) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \vec{\sigma}(x) \cdot \Delta_{x,y} \vec{\sigma}(y) - d\,|\Lambda| = -\frac{1}{2} \underline{\vec{\sigma}} \cdot \Delta \underline{\vec{\sigma}}(y) - d\,|\Lambda| \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\substack{|x-y|=1 \\ x,y \in \Lambda}} \big(\vec{\sigma}(x) - \vec{\sigma}(y)\big)^2 - d\,|\Lambda|\,. \end{aligned}$$

Legyen $\vec{v}(\cdot)$ tetszőleges $\mathbb{R}^\nu$-beli vektorértékű függvény (vektormező) Λ-n:

$$\Lambda \ni x \mapsto \vec{v}(x) = (v_1(x), \ldots, v_\nu(x)) \in \mathbb{R}^\nu$$

és értelmezzük a következő $\underline{\vec{v}}$-függő állapotösszeget:

$$Z_\Lambda(\underline{\vec{v}}) = \int_{\Omega_\Lambda} \exp\{\frac{\beta}{2} (\underline{\vec{\sigma}} + \underline{\vec{v}}) \cdot \Delta\, (\underline{\vec{\sigma}} + \underline{\vec{v}})\}.$$

Vegyük észre, hogy $Z_\Lambda(\underline{\vec{v}})$ csak a $\vec{v}(x) - \vec{v}(y)$ különbségektől függ. $Z_\Lambda(\underline{\vec{0}}) = Z_\Lambda$ pontosan a (8.2)-beli Gibbs-mérték szokásos állapotösszege. Az alábbi azonosságot könnyű ellenőrízni:

$$Z_\Lambda(\underline{\vec{v}}) = \exp\{\frac{\beta}{2} \underline{\vec{v}} \cdot \Delta \underline{\vec{v}}\} Z_\Lambda(\underline{\vec{0}}) \left\langle \exp\{\beta \underline{\vec{v}} \cdot \Delta \underline{\vec{\sigma}}\} \right\rangle_\Lambda . \tag{8.6}$$

29. Tétel. *A következő állítások igazak:*

(1) *A* $\underline{\vec{v}} \mapsto Z_\Lambda(\underline{\vec{v}})$ *függvénynek* $\underline{\vec{v}} = \underline{\vec{0}}$*-ban globális maximuma van, azaz* $\forall \underline{\vec{v}}$*:*

$$Z_\Lambda(\underline{\vec{v}}) \leq Z_\Lambda(\underline{\vec{0}}). \tag{8.7}$$

(1') (Gaussian Domination) $\forall \underline{\vec{v}}$*:*

$$\left\langle \exp\{\underline{\vec{v}} \cdot \Delta \underline{\vec{\sigma}}\} \right\rangle_\Lambda \leq \exp\{-\frac{1}{2\beta} \underline{\vec{v}} \cdot \Delta \underline{\vec{v}}\}. \tag{8.8}$$

(2) $\forall \underline{\vec{v}}$*:*

$$\sum_{i,j=1}^{\nu} \sum_{s,t,x,y \in \Lambda} v_i(s) \Delta_{s,x} \left\langle \sigma_i(x) \sigma_j(y) \right\rangle_\Lambda \Delta_{y,t} v_j(t) = \underline{\vec{v}} \cdot \Delta \left\langle \underline{\vec{\sigma}} \underline{\vec{\sigma}} \right\rangle_\Lambda \cdot \Delta \underline{\vec{v}}$$
$$\leq -\frac{1}{\beta} \underline{\vec{v}} \cdot \Delta \underline{\vec{v}}.$$

(2') (Infrared Bound) $\forall \Lambda^* \ni p \neq 0$*:*

$$\left(\frac{1}{\beta D(p)} \delta_{i,j} - \hat{c}_{i,j}(p) \right)_{i,j=1}^{\nu}$$

pozitív szemidefinit mátrix.

9. Megjegyzés. *A fenti négy állíás logikailag a következőképp viszonyul egymáshoz:*

$$(1) \Leftrightarrow (1') \Rightarrow (2) \Leftrightarrow (2').$$

(1) *és* (1′) *ekvivalenciája (8.6)-ból közvetlenül adódik,* (2) *és* (2′) *ekvivalenciája pedig Fourier transzformáció útján. (8.8)-at másodrendig sorbafejtve* $\underline{\vec{v}}$ *szerint megkapjuk a középső implikációt. Nekünk végülis* (2′)*-re lesz szükségünk, de az erősebb* (1) *állítást fogjuk belátni.*

A 29. Tétel bizonyítása

30. Állítás (Tükrözési pozitivitás = Reflection positivity)**.** *Legyen* (Ω, μ) *véges mértéktér és*

$$A, B, C_1, \dots, C_l, D_1, \dots, D_l : \Omega \to \mathbb{C}$$

korlátos, mérhető függvények. A következő egyenlőtlenség igaz:

$$\left| \int_{\Omega\times\Omega} d\mu(s)d\mu(t) \exp\{A(s) + B(t) - \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{l} [C_k(s) - D_k(t)]^2\} \right|^2 \leq \tag{8.9}$$

$$\int_{\Omega\times\Omega} d\mu(s)d\mu(t) \exp\{A(s) + \overline{A(t)} - \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{l} \left[C_k(s) - \overline{C_k(t)}\right]^2\}\times$$

$$\int_{\Omega\times\Omega} d\mu(s)d\mu(t) \exp\{B(s) + \overline{B(t)} - \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{l} \left[D_k(s) - \overline{D_k(t)}\right]^2\} \tag{8.10}$$

Tükrözési pozitivitás bizonyítása: $l = 1$-re fogjuk az állítst bizonyítani, általános $l \in \mathbb{N}$-re a bizonyítás elvben nem nehezebb, csak a jelölés bonyolódik el.

$$\left| \int_\Omega \int_\Omega d\mu(s)d\mu(t) \exp\{A(s) + B(t) - \frac{1}{2}[C(s) - D(t)]^2\} \right|^2$$

$$\stackrel{1}{=} \left| \int_\Omega \int_\Omega d\mu(s)d\mu(t) \exp\{A(s) + B(t)\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \exp\{i\xi[C(s) - D(t)]\} \right|^2$$

$$\stackrel{2}{=} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \left(\int_\Omega d\mu(s) \exp\{A(s) + i\xi C(s)\} \right) \right.$$

$$\left. \times \left(\int_\Omega d\mu(t) \exp\{B(t) - i\xi D(t)\} \right) \right|^2$$

$$\stackrel{3}{\leq} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \int_\Omega d\mu(s) \exp\{A(s) + i\xi C(s)\} \int_\Omega d\mu(t) \exp\{\overline{A(t)} - i\xi \overline{C(t)}\}\times$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \int_\Omega d\mu(s) \exp\{\overline{B(s)} + i\xi \overline{D(s)}\} \int_\Omega d\mu(t) \exp\{B(t) - i\xi D(t)\}$$

$$\stackrel{4}{=} \int_\Omega \int_\Omega d\mu(s)d\mu(t) \exp\{A(s) + \overline{A(t)}\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \exp\{i\xi[C(s) - \overline{C(t)}]\}\times$$

$$\int_\Omega \int_\Omega d\mu(s)d\mu(t) \exp\{\overline{B(s)} + B(t)\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \exp\{i\xi[\overline{D(s)} - D(t)]\}$$

$$\stackrel{5}{=} \int_\Omega \int_\Omega d\mu(s) d\mu(t) \exp\{A(s) + \overline{A(t)} - \frac{1}{2}[C(s) - \overline{C(t)}]^2\} \times$$
$$\int_\Omega \int_\Omega d\mu(s) d\mu(t) \exp\{\overline{B(s)} + B(t) - \frac{1}{2}[\overline{D(s)} - D(t)]^2\}$$

Az első egyenlőségben az

$$e^{-z^2/2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \exp\{i\xi z\}, \qquad z \in \mathbb{C} \tag{8.11}$$

azonosságot használtuk. A második egyenlőségben az integrálás sorrendjét cseréltük fel (konvergencia probléma nincsen). A harmadik lépésben a Schwarz-egyenlőtlenséget használtuk. A negyedik és ötödik lépésben újból (visszafelé) felcseréltük az integrálási sorrendeket, illetve a (8.11) Gauss-integrál formulát használtuk ki.

□

Most rátérünk a (8.7) egyenlőtlenség bizonyítására. Feltesszük, hogy a Λ diszkrét tórusz minden oldalának hossza *páros*. Legyen

$$\Lambda = \Lambda_{\text{jobb}} \cup \Lambda_{\text{bal}} \tag{8.12}$$

a Λ tórusz felbontása két szimmetrikus félre egy olyan hipersík által, amely csak éleket metsz félbe és

$$R : \Lambda \to \Lambda$$

a (8.12) felbontást megvalósító hipersík szerinti természetes tükrözés. A Tükrözési Pozitivitást alkalmazzuk a következő szituációra:

$$\Omega = \left(S^{\nu-1}\right)^{\Lambda_{\text{jobb}}} = \left(S^{\nu-1}\right)^{\Lambda_{\text{bal}}},$$
$$s = (\vec{\sigma}(x))_{x\in\Lambda_{\text{jobb}}}, \qquad t = (\vec{\sigma}(x))_{x\in\Lambda_{\text{bal}}},$$
$$d\mu(s) = \prod_{x\in\Lambda_{\text{jobb}}} d\vec{\sigma}(x), \qquad d\mu(t) = \prod_{x\in\Lambda_{\text{bal}}} d\vec{\sigma}(x),$$
$$A(s) = -\frac{\beta}{4} \sum_{\substack{|x-y|=1 \\ x,y\in\Lambda_{\text{jobb}}}} \left(\vec{\sigma}(x) + \vec{v}(x) - \vec{\sigma}(y) - \vec{v}(y)\right)^2,$$
$$B(t) = -\frac{\beta}{4} \sum_{\substack{|x-y|=1 \\ x,y\in\Lambda_{\text{bal}}}} \left(\vec{\sigma}(x) + \vec{v}(x) - \vec{\sigma}(y) - \vec{v}(y)\right)^2,$$
$$k = \big((x,y), i\big) : \qquad x \in \Lambda_{\text{jobb}}, \;\; y \in \Lambda_{\text{bal}}, \;\; i = 1, \dots, \nu,$$
$$[C_k(s) - D_k(t)]^2 = \beta \left(\sigma_i(x) + v_i(x) - \sigma_i(y) - v_i(y)\right)^2.$$

Ha $\underline{\vec{v}}$ adott vektormező Λ-n, akkor legyen $\underline{\vec{v}}_{\mathrm{j}}$ ill. $\underline{\vec{v}}_{\mathrm{b}}$ a kövekező két vektormező:

$$\vec{v}_{\mathrm{j}}(x) := \begin{cases} v(x) & \text{ha} \quad x \in \Lambda_{\mathrm{jobb}} \\ v(Rx) & \text{ha} \quad x \in \Lambda_{\mathrm{bal}} \end{cases}$$
$$\vec{v}_{\mathrm{b}}(x) := \begin{cases} v(x) & \text{ha} \quad x \in \Lambda_{\mathrm{bal}} \\ v(Rx) & \text{ha} \quad x \in \Lambda_{\mathrm{jobb}} \end{cases}$$

A fenti azonosításokkal (8.9) Tükrözési pozitivitás alkalmazásával következik, hogy

$$Z_\Lambda(\underline{\vec{v}})^2 \leq Z_\Lambda(\underline{\vec{v}}_{\mathrm{j}}) Z_\Lambda(\underline{\vec{v}}_{\mathrm{b}}). \tag{8.13}$$

Mivel

$$\lim_{\|\underline{\vec{v}}\|\to\infty} Z_\Lambda(\underline{\vec{v}}) = 0$$

a $Z_\Lambda(\cdot)$ maximumhelyei egy kompakt tartományon belül vannak. Legyen $\underline{\vec{v}}^*$ olyan maximum-hely, amelyre

$$\gamma^* = |\{(x,y) \text{ él } \Lambda\text{-ban } : \vec{v}^*(x) \neq \vec{v}^*(y)\}|$$

lehető minimális. Ha $\gamma^* = 0$, akkor $\underline{\vec{v}}^* = \underline{\vec{0}}$, tehát (8.7) igaz. Tegyük fel hát, hogy $\gamma^* \neq 0$. Valósítsuk meg a (8.12) felosztást olyan tükrözési síkkal, amely *keresztülmetsz egy olyan* (x,y) *élet, amely mentén* $\vec{v}^*(x) \neq \vec{v}^*(y)$. Mivel $\underline{\vec{v}}^*$ maximum-hely, (8.13) alapján $\underline{\vec{v}}^*_{\mathrm{j}}$-nek és $\underline{\vec{v}}^*_{\mathrm{b}}$-nek is maximum-helynek kell lennie, egyébként – (8.13) miatt – ellentmondáshoz jutnánk. De világos, hogy

$$\gamma^*_{\mathrm{j}} = \left|\{(x,y) \text{ él } \Lambda\text{-ban } : \vec{v}^*_{\mathrm{j}}(x) \neq \vec{v}^*_{\mathrm{j}}(y)\}\right|$$
$$\gamma^*_{\mathrm{b}} = |\{(x,y) \text{ él } \Lambda\text{-ban } : \vec{v}^*_{\mathrm{b}}(x) \neq \vec{v}^*_{\mathrm{b}}(y)\}|$$

közül legalább az egyik *szigorúan kisebb* γ^*-nál. Ezzel ellentmondáshoz jutottunk, tehát $\gamma^* = 0$ és $\underline{\vec{v}}^* = \underline{\vec{0}}$ valóban globális maximum-hely.

Ezzel Fröhlich, Simon és Spencer tételét is beláttuk.

8.7. Néhány megjegyzés és tanulság

(1) A módszer ereje az általánosság: a *Tükrözési Pozitivitás* algebrailag messzemenően általánosítható. Máig is egyetlen módszer folytonos szimmetriatörés bizonyítására. Kvantum alkalmazást később fogunk látni.

(2) A módszer hátrányai az algebrai merevségből adódnak, ezt majd a kvantum esetben fogjuk igazán érzékelni

(3) Figyelmesen végigkövetve a bizonyítást láthatjuk, hogy a rács geometriai struktúrája fontos (pl. páros oldalhosszat kell feltételezni) továbbá azt, hogy a kölcsönhatás ferromágneses. (A kvantum esetben érdekes meglepetésben lesz részünk.)

A fejezethez kapcsolódó irodalom: [9], [7], [8], [21], [22], [23].

9. fejezet

A kvantum Heisenberg-modell

9.1. Kvantum statisztikus fizikai formalizmus

$\mathcal{H}$ szeparábilis komplex Hilbert tér: a $\mathcal{H}$-beli vektorok (pontosabban egydimenziós alterek) a leírt fizikai rendszer állapotai. H önadjungált lineáris operátor $\mathcal{H}$ felett: a fizikai rendszer Hamilton-operátora. Feltesszük, hogy minden pozitív β-ra

$$Z(\beta) := \operatorname{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$$

véges. Konkrét esetünkben $\mathcal{H}$ véges dimenziós lesz, tehát korlátossági problémák nem lépnek fel, a Tr-ek automatikusan végesek. Megfigyelhető fizikai mennyiségeket korlátos önadjungált operátorok reprezentálnak. Termikus átlagok:

$$\langle A \rangle := \frac{\operatorname{Tr}\left(A e^{-\beta H}\right)}{Z(\beta)}.$$

Korreláció jellegű mennyiségeket lejjebb fogunk definiálni.

9.2. $SU(2)$ reprezentációi

Az $SU(2)$ csoport véges dimenziós irreducibilis reprezentációi jól ismertek. Minden $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$-hoz van pontosan egy $2s+1$ dimenziós, azaz $\mathbb{C}^{2s+1}$ feletti irreducibilis, hű ábrázolás, amelynek $\vec{S} = (S_1, S_2, S_3)$ generátorai a következő kommutációs szabályoknak tesznek eleget:

$$[S_\alpha, S_\beta] = i\epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} S_\gamma, \qquad \alpha.\beta, \gamma \in \{1, 2, 3\}, \tag{9.1}$$

$$S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = s(s+1)I. \tag{9.2}$$

Továbbá: a (9.1), (9.2) relációk unitér ekvivalenciáig egyértelműen meghatározzák az $\vec{S} = (S_1, S_2, S_3)$ generátorokat. Konkétan, $s = 1/2$ esetén a $\vec{S} = (S_1, S_2, S_3)$ generátorok a Pauli mátrixok:

$$S_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Ha $\vec{v} \in \mathbb{R}^3$, legyen

$$S_{\vec{v}} = \vec{v} \cdot \vec{S} = v_1 S_1 + v_2 S_2 + v_3 S_3.$$

A (9.1) kommutációs szabályokból adódik, hogy

$$[S_{\vec{v}}, S_{\vec{u}}] = i S_{\vec{v} \times \vec{u}}.$$

Ez utóbbi kommutációs relációnak pedig egyenes következménye, hogy

$$e^{iS_{\vec{v}}} S_{\vec{u}} e^{-iS_{\vec{v}}} = S_{\Omega_{\vec{v}} \vec{u}}, \tag{9.3}$$

ahol $\Omega_{\vec{v}}\vec{u}$ az $\vec{u}$ vektornak a $\vec{v}$ vektor körüli $|\vec{v}|$ szöggel való elforgatottja. Tehát az $e^{iS_{\vec{v}}}$ unitér operátor a spin térben való forgatásként hat.

Néha kényelmesebb az (S_1, S_2, S_3) generátorok helyett az (S^+, S^-, S_3) generátorokat használni, ahol

$$S^+ := S_1 + iS_2, \qquad S^- := S_1 - iS_2.$$

Ezek kommutációs szabályai:

$$[S^+, S^-] = 2S_3, \qquad [S_3, S^\pm] = \pm S^\pm.$$

A továbbiakban szabadon fogjuk használni mindkét generátorrendszert, aszerint, hogy mikor melyik kényelmesebb.

9.3. A kvantum Heisenberg-modell

Legyen Λ egy d dimenziós diszkrét tórusz, amelynek minden oldalhossza páros. Azaz $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ páros oldalhosszú téglatest alakú doboz, periodikus peremfeltételekkel. Hilbert terünk

$$\mathcal{H}_\Lambda = \otimes_{x\in\Lambda}\mathbb{C}^{2s+1},$$

$\mathcal{H}_\Lambda$ dimenziója ($\mathbb{C}$ felett) $\dim(\mathcal{H}_\Lambda) = (2s+1)^{|\Lambda|} < \infty$. Ha A egy operátor $\mathbb{C}^{2s+1}$ felett, akkor jelöljük $A(x)$-szel a következő tenzor-szorzat operátort $\mathcal{H}_\Lambda$ felett:

$$A(x) = I \otimes \cdots \otimes A \otimes I \cdots \otimes I,$$

ahol A az $x \in \Lambda$ rácspont feletti $\mathbb{C}^{2s+1}$ téren hat.

A Heisenberg-modell Hamilton-operátora:

$$\begin{aligned} H_\Lambda &= -\frac{1}{2}\sum_{\substack{x,y\in\Lambda\\|x-y|=1}} \left(S_1(x)S_1(y) + S_2(x)S_2(y) + uS_3(x)S_3(y)\right) - h\sum_{x\in\Lambda} S_3(x) \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{\substack{x,y\in\Lambda\\|x-y|=1}} \big(S^+(x)S^-(y) + uS_3(x)S_3(y)\big) - h\sum_{x\in\Lambda} S_3(x). \end{aligned}$$

Tehát: első szomszéd spinek (spin térben) anizotrop mágneses kölcsönhatással hatnak kölcsön és a 3-adik („z”-irányú) spin irányban külső mágneses tér hat. Irodalomban ezt a modellt gyakran „XXZ-modell”-nek nevezik, érthető okokból. Ha $u > 0$, a modell *ferromágneses*. Ha $u < 0$, akkor *antiferromágneses*. Ez a következő módon látható: legyen

$$U = \exp\left(i\pi \sum_{\substack{x\in\Lambda\\ x_1+\cdots+x_d \text{páros}}} S_3(x)\right).$$

(9.3) értemében az U unitér operátor a páros alrácson ülő spineket forgatja meg π szöggel a 3-dik spin irány körül. Könnyű belátni, hogy az U unitér operátor a következő módon transzformálja a Hamilton-operátort:

$$UH_\Lambda U^* = \frac{1}{2}\sum_{\substack{x,y\in\Lambda\\|x-y|=1}} \left(S_1(x)S_1(y) + S_2(x)S_2(y) - uS_3(x)S_3(y)\right) - h\sum_{x\in\Lambda} S_3(x)$$

Tehát $u < 0$ esetén valóban antiferromágneses kölcsönhatásokat kapunk. $u = 0$ esetén 'XY'-modellről beszélünk, amely egyenlő módon ferro- vagy antiferromágneses (ill. egyik sem). $u = +1$ az *izotrop ferromágnest*, $u = -1$ az *izotrop antiferromágnest* adja.

9.4. Belső szimmetriák

Klasszikus (i.e. nem kvantum) rendszerek belső szimmetriáit az állapottéren ható csoporthatás írja le. Pontosabban, Ω az állapottér és $H : \Omega \to \mathbb{R}$ a Hamilton-függvény. A G csoport a rendszer belső szimmetriája, ha létezik egy $G \ni g \mapsto T_g \in Aut(\Omega)$ csoporthatás az Ω állapottéren, amely a H Hamilton-függvényt invariánsan hagyja:

$$(\forall g \in G) \qquad H(T_g \omega) = H(\omega).$$

Példák:

(1) Párkölcsönhatású Ising-modell $h = 0$ külső mágneses térben – $\mathbb{Z}_2$ a belső szimmetriája (spinek szimultán megfordítása).

(2) Klasszikus Heisenberg-modell $\nu > 1$ komponensű spinekkel:

(a) $\vec{h} = \vec{0}$ külső mágneses térben $O(\nu)$ a belső szimmetria (spinek szimultán párhuzamos forgatása);

(b) $\vec{h} \neq \vec{0}$ külső mágneses térben $O(\nu - 1)$ a belső szimmetria (a spinek $\vec{h}$-ra merőleges komponensének szimultán párhuzamos forgatása).

Kvantumrendszerek belső szimmetriáit a G csoport $\mathcal{H}$ feletti unitér vagy antiunitér reprezentációi irják le, amelyek a Hamilton-operátort invariánsan hagyják. Azaz: a G csoport a fizikai rendszer belső szimmetriája, ha létezik egy $G \ni g \mapsto U_g \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ unitér vagy antiunitér reprezentáció, amelyre

$$(\forall g \in G) \qquad U_g H U_g^* = H.$$

Írjuk le a kvantum Heisenberg-modell belső szimmetriáit!

Folytonos szimmetriák

- Ha $|u| \neq 1$ *vagy* $h \neq 0$, $U(1)$ belső szimmetria.

14. Házi feladat. Ellenőrizzük a

$$\left[\sum_{x\in\Lambda} S_3(x), H_\Lambda\right] = 0$$

kommutációs relációt.

Mivel $\sum_{x\in\Lambda} S_3(x)$ az $U(1)$ csoportnak $\mathcal{H}_\Lambda$ feletti (reducibilis) reprezentációját generálja:

$$(-2\pi, 2\pi] \ni \theta \mapsto U_\theta := \exp\left(i\theta \sum_{x\in\Lambda} S_3(x)\right). \tag{9.4}$$

Állításunk (9.3)-ból egyenesen adódik.

- Ha $|u| = 1$ *és* $h = 0$, a folytonos belső szimmetria $SU(2)$-vé bővül.

15. Házi feladat. Ebben az esetben ellenőrizzük a következő kommutációs relációkat:

$$\left[\sum_{x\in\Lambda} S_\alpha(x), H_\Lambda\right] = 0, \qquad \alpha = 1, 2, 3.$$

Mivel $\sum_{x\in\Lambda} S_\alpha(x)$, $\alpha = 1, 2, 3$ az $SU(2)$ csoportnak $\mathcal{H}_\lambda$ feletti (reducibilis) reprezentációjának generátorai, (9.3)-ból valóban adódik $SU(2)$ mint belső szimmetria.

Diszkrét szimmetria

- Ha $|u| \neq 1$ *és* $h = 0$, a fent már megtalált $U(1)$ szimmetria mellett található még egy $\mathbb{Z}_2$ szimmetria is. Legyen

$$R = \exp\left(i\pi \sum_{x\in\Lambda} S_1(x)\right).$$

16. Házi feladat. Ellenőrizni, hogy $h = 0$ esetben

$$RHR^* = H$$

és

$$U_\theta R = RU_{-\theta}, \tag{9.5}$$

ahol U_θ (9.4)-ben megadott forgatás.

Összegezve, a következő szimmetriákat kaptuk:

$h \neq 0:$	$U(1)$	
$\lvert u\rvert \neq 1, h = 0:$	$U(1) + \mathbb{Z}_2$	(9.5)-beli szorzásszabállyal
$\lvert u\rvert = 1, h = 0:$	$SU(2)$.	

Bennünket most a folytonos szimmetria esetleges sérülése érdekel. A belső szimmetriák kóvetkeztében könnyű belátni, hogy

$$\langle S_\alpha(x)\rangle = 0. \tag{9.6}$$

Értelmezzük a hosszútávú rend paramétert:

$$r(\beta) := \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d} r_\Lambda(\beta) = \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d} \left\langle \left(\frac{\sum_{x\in\Lambda} S_\alpha(x)}{|\Lambda|} \right)^2 \right\rangle, \tag{9.7}$$

(9.6)-ban és (9.7)-ben $\alpha = 1, 2$ az anizotrop ($|u| \neq 1$ vagy $h \neq 0$) esetben és $alpha = 1, 2, 3$ az izotrop ($|u| = 1$, $h = 0$) esetben.

Újból kétféleképpen értelmezhetjük a belső szimmetria sérülését:

(1) Egyik kérdés a *hosszú távú rend* (LRO) léte: $r(\beta) \overset{?}{>} 0$.

(2) Másodszor: bevezethetünk egy kis szimmetria sértő tagot a Hamilton-operátorba, amit a termodinamikai limesz után eltüntetünk, és kérdezhetjük, hogy mindezek után marad-e nyoma a szimmetria sértésnek, van-

e ún. *spontán mágnesezettség.* Legyen

$$
\begin{aligned}
H_\Lambda^{(\varepsilon)} &= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{x,y\in\Lambda \\ |x-y|=1}} \left(S_1(x)S_1(y) + S_2(x)S_2(y) + uS_3(x)S_3(y)\right) \\
&\quad - h\sum_{x\in\Lambda} S_3(x) - \varepsilon \sum_{x\in\Lambda} S_1(x) \\
&= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{x,y\in\Lambda \\ |x-y|=1}} \left(S^+(x)S^-(y) + uS_3(x)S_3(y)\right) \\
&\quad - h\sum_{x\in\Lambda} S_3(x) - \varepsilon \sum_{x\in\Lambda} S_1(x),
\end{aligned} \tag{9.8}
$$

és jelöljük $\langle\cdots\rangle^{(\varepsilon)}$-vel az ezzel a Hamilton-operátorral számolt átlagokat. Legyen

$$
\eta^{(\varepsilon)}(\beta) = \lim_{\Lambda\nearrow\mathbb{Z}^d} \eta_\Lambda^{(\varepsilon)}(\beta) = \lim_{\Lambda\nearrow\mathbb{Z}^d} \langle S_1(x)\rangle^{(\varepsilon)}.
$$

A második kérdés tehát, hogy van-e *spontán mágnesezettség* (SM): $\lim_{\varepsilon\to 0}\eta^{(\varepsilon)}(\beta) \overset{?}{\neq} 0$.

E két kérdés nem teljesen – de szinte – ekvivalens. Bizonyítás nélkül fogadjuk el a következő állítást:

31. Tétel (R. Griffiths tétele)**.**

$$
const.r(\beta) \le \left(\lim_{\varepsilon\to 0}\eta^{(\varepsilon)}(\beta)\right)^2
$$

ahol const. csak a dimenziótól és a spin sagyságától (s-től) függő konstans.

Azaz: a hosszútávú rend létezéséből következik a spontán mágnesezettség. ill. a spontán mágnesezettség hiányából következik a hosszútávú rend hiánya is. Ez *R. Griffiths* egy tételének kiterjesztése kvantum esetre. Bizonyítása több helyen is megtalálható, pl. *Dyson, Lieb és Simon* [4] és *Roepstorff* [27] cikkeiben (részben) és *Koma és Tasaki* [16] cikkében.

9.5. Eredmények

A negatív eredmény

32. Tétel (Mermin-Wagner-tétel kvantum esetre)**.** *Egy és két dimenzióban, bármely s spin, u csatolás és h külső mágneses tér paraméterértékekre, bármely véges β mellett (azaz bármely pozitív hőmérsékleten)* $\lim_{\varepsilon\to 0}\eta^{(\varepsilon)}(\beta) = 0$*. Azaz: nincsen spontán mágnesezettség.*

10. Megjegyzés. *Ebből persze az LRO hiánya is következik.*

A pozitív eredmény

33. Tétel (Dyson-Lieb-Simon-tétel (1978) és következményei)**.** *Három és magasabb dimenzióban, bármely $s \geq 1/2$ spinre, $h = 0$ és $-1 \leq u \leq 0$ paraméterértékek mellett létezik $\beta_c < \infty$ ($T_c > 0$), úgy, hogy $\beta > \beta_c$ ($T < T_c$) mellett $r(\beta) > 0$, azaz van LRO.*

Fontos észrevenni, hogy a tétel csak az antiferromágneses modellre állít szimmetria sérülést, a ferromágneses modell fázisátmenete máig nyitott kérdés. Az $u \geq -1$ megszorítást azert kell tenni, mert $u < -1$, $h = 0$ esetén nagyon alacsony hőmérsékleten a $\mathbb{Z}_2$ szimmetria sérül, Ising-típusú fázisátmenet dominál. A $h = 0$ megszorítás sem természetes fizikai szempontból: mi az $1-2$ spinkomponensek hosszútávú rendezettségét vizsgáljuk, a h *tranzverzális* külső tér, h kis értékei mellett fizikailag feltételezhető az $1-2$ spinkomponensek hosszú távú rendezettsége. Ezek a hiányosságok a bizonyítási módszer (RP) algebrai merevségéből adódnak. A (matematikailag szigorú) kvantum statisztikus fizika egyik legnagyobb kihívása egy esetleges új bizonyítási gondolat megtalálása, amely kezelni tudná az egyelőre kezelhetetlen eseteket. Többeknek (nagy „guruknak” is) törött már bele a bicskája ebbe a vállalkozásba!

Kvantum modellekben általában az alapállapoti $T = 0$, $\beta = \infty$ viselkedés sem triviális (szemben a klasszikusakkal). A ferromágneses modell ($u > 0$) alapállapotát könnyű megtalálni tenzor-szorzat alakban. Az antiferromágnesét viszont nem. A fenti Dyson–Lieb–Simon-tételből $\beta \to \infty$ határesetben persze megkapjuk az alapállapoti hosszútávú rendet, nyitva marad viszont az egy- és kétdimenziós modell alapállapotának kérdése. A következő tétel részleges választ ad:

34. Tétel (Dyson-Lieb-Simon, Kubo-Kishi). *Két dimenzióban, bármely $s \geq 1$ spinre, $h = 0$ és $-1 \leq u \leq 0$ paraméterértékek mellett az alapállapotban $r(\infty) > 0$, azaz van LRO.*

11. Megjegyzés. *Nyitott kérdés az $s = 1/2$ spinű modell alapállapoti rendezettsége.*

A következőkben a 32. tételt és a 33. tételt fogjuk bizonyítani.

9.6. Kvantum korrelációs egyenlőtlenségek I.: Bogoljubov – Roepstorff

$\mathcal{H}$ véges dimenziós komplex Hilbert tér, $H = H^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ Hamilton-operátor, $A, B, C, \dots \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ operátorok. A véges dimenziót csak azért tesszük fel, hogy bizonyos megfogalmazások egyszerüsödjenek. Minden állításunk igaz marad a következő általánosabb feltételek mellett is: $\mathcal{H}$ szeparábilis, $H = H^*$ és $\exp(-\beta H)$, $\beta > 0$ trace class, $A, B, C, \dots \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ korlátosak.

E részen belül a β-tól való függést nem jelöljük. Az állapotösszeg:

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right).$$

Az A operátor átlaga:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(A e^{-\beta H}\right).$$

Két operátor, A és B, *Duhamel féle korrelációját* a következőképpen értelmezzük:

$$(A, B) = \frac{1}{Z} \int_0^1 \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(1-s)H} A^* e^{-\beta s H} B\right) ds.$$

Vegyük észre, hogy $(\cdot, \cdot)$ *skalár szorzat* $\mathcal{B}(\mathcal{H})$-n. Két megfigyelhető mennyiség, A és B, fizikailag megfigyelhető korrelációja persze

$$\langle AB \rangle = \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\left(AB e^{-\beta H}\right),$$

de látni fogjuk, hogy a számolások során, a klasszikus (i.e. kommutatív) statisztikus fizika korrelációival analóg objektum a Duhamel korreláció – ez a kvantummechanika nem-kommutativitásának következménye és bizonyos bonyodalmakat fog okozni. Mindez a következő két azonosságból következik:

$$\langle A\rangle = \frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\lambda}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H+\lambda A}\right)\Big|_{\lambda=0}, \tag{9.9}$$

$$(A,B) = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2}{\partial\lambda\partial\mu}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H+\lambda A^*+\mu B}\right)\Big|_{\lambda=\mu=0}. \tag{9.10}$$

(9.9) és (9.10) az alábbi Lie – Trotter-formula következménye:

17. Házi feladat. Ha T és S két tetszőleges $N\times N$-es (véges dimenziós) mátrix, akkor

$$e^{T+S} = \lim_{k\to\infty}\left(e^{T/k}e^{S/k}\right)^k.$$

35. Tétel (Bogoljubov- és Roepstorff-egyenlőtlenségek)**.** *(i) Bogoljubov-egyenlőtlenség:*

$$\sup_{C\in\mathcal{B}(\mathcal{H})}\frac{|\langle[C^*,A]\rangle|^2}{\beta\langle[[C^*,H],C]\rangle} \le \frac{1}{2}\langle\{A^*,A\}\rangle. \tag{9.11}$$

(ii) Roepstorff-egyenlőtlenség:

$$\sup_{C\in\mathcal{B}(\mathcal{H})}\frac{|\langle[C^*,A]\rangle|^2}{\beta\langle[[C^*,H],C]\rangle}. \le (A,A) \le \frac{1}{2}\langle\{A^*,A\}\rangle\frac{\frac{\langle[A^*,A]\rangle}{\langle\{A^*,A\}\rangle}}{\tanh^{-1}\left(\frac{\langle[A^*,A]\rangle}{\langle\{A^*,A\}\rangle}\right)}. \tag{9.12}$$

12. Megjegyzés. *A (9.12) Roepstorff-egyenlőtlenség kicsivel erősebb az immár klasszikus (9.11) Bogoljubov-egyenlőtlenségnél. A Mermin – Wagner-tétel bizonyításában a Bogoljubov-egyemlőtlenséget fogjuk használni, de más körülmények között nagyon hasznos tud lenni a Roepstorff-egyenlőtlenség.*

Bogoljubov- és Roepstorff-egyenlőtlenségek bizonyítása. Mivel bármely $y\in\mathbb{R}$-re

$$0 < \frac{y}{\tanh^{-1}y} < 1,$$

(9.12) jobb oldala nyilvánvalóan minorálja (9.11) jobboldát. Ezért csak a (9.12) egyenlőtlenségeket kell bizonyíatnunk.

A továbbiakban a következő két azonosságból indulunk ki (mindkettő az exponenciális függvény differenciálásából és a Tr tulajdonságaiból adódik egyszerűen):

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(1-s)H}A^*e^{-\beta sH}B\right) &= \beta\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(1-s)H}[H,A^*]e^{-\beta sH}B\right) \\ &= \beta\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(1-s)H}A^*e^{-\beta sH}[B,H]\right) \qquad (9.13) \\ \frac{d^2}{ds^2}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(1-s)H}A^*e^{-\beta sH}B\right) &= \beta^2\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(1-s)H}[H,A^*]e^{-\beta sH}[B,H]\right) \qquad (9.14) \end{aligned}$$

Értelmezzük a $k:[0,1]\to\mathbb{R}$,

$$k(s) := \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta(1-s)H}A^*e^{-\beta sH}A\right)$$

függvényt. (9.13)-ból és (9.14)-ből Schwarz egyenlőtlenség segítségével azt kapjuk, hogy

$$k''(s)k(s)-k'(s)^2\geq 0,$$

amiből az következik, hogy $s\mapsto \ln k(s)$ *konvex*, és

$$\begin{aligned} (A,A) = \int_0^1 k(s)ds &\leq \int_0^1 k(0)^{1-s}k(1)^s ds \\ &= \big(k(1)-k(0)\big)\ln\frac{k(1)}{k(0)} \\ &= \frac{1}{2}\langle\{A^*,A\}\rangle\frac{\frac{\langle[A^*,A]\rangle}{\langle\{A^*,A\}\rangle}}{\tanh^{-1}\left(\frac{\langle[A^*,A]\rangle}{\langle\{A^*,A\}\rangle}\right)} \end{aligned}$$

Innen a jobb oldali egyenlőtlenség (9.12)-ben.

A (9.12)-beli bal oldali egyenlőtlenséget a következőképpen kapjuk: mivel $(\cdot,\cdot)$ skalárszorzat $\mathcal{B}(\mathcal{H})$-n

$$(A,A) = \sup_{B\in\mathcal{B}(\mathcal{H})}\frac{\big|(A,B)\big|^2}{(B,B)} \geq \sup_{C\in\mathcal{B}(\mathcal{H})}\frac{\big|(A,[C,H])\big|^2}{([C,H],[C.H])} \qquad (9.15)$$

(9.13)-ból következik, hogy

$$([C,H],A) = -\frac{1}{\beta}\langle [C^*,A]\rangle,$$
$$([C,H],[C,H]) = \frac{1}{\beta}\big\langle \big[[C,H],C^*\big]\big\rangle = \frac{1}{\beta}\big\langle \big[[C^*,H],C\big]\big\rangle.$$

Ezeket behelyettesítve (9.15)-be megkapjuk (9.12)-ben a bal oldali egyenlőtlenséget kapjuk.

□

13. Megjegyzés. *Ha csak a (gyengébb) Bogoljubov-egyenlőtlenséget akarjuk belátni, elegendő a $s \mapsto k(s)$ függvény konvexségét használni. (Azaz: (9.11)-hez nem kell $s \mapsto k(s)$ log-konvexitása.)*

9.7. Mermin – Wagner-tétel bizonyítása

A Bogoljubov-egyenlőtlenséget alkalmazzuk a (9.8)-ban megadott (szimmetriasértő taggal kiegészített) Hamilton-operátorral és az A, A^* és C, C^* operátorok következő választásával:

$$A = \hat{S}^+(p) := \sum_{x\in\Lambda} e^{ip\cdot x}S^+(x) \qquad A^* = (\hat{S}^+(p))^* = \hat{S}^-(-p)\sum_{x\in\Lambda} e^{-ip\cdot x}S^-(x)$$
$$C = \hat{S}_3(p) = \sum_{x\in\Lambda} e^{ip\cdot x}S_3(x), \qquad C^* = (\hat{S}_3(p))^* = \hat{S}_3(-p)\sum_{x\in\Lambda} e^{-ip\cdot x}S_3(x)$$

A Bogoljubov-egyenlőtlenségben megjelenő kommutátorokat elég fáradságos, de nem nehéz kiszámolni.

18. Házi feladat. Végezzük el a fenti számolást.

Hosszadalmas számolások után a következő eredményeket kapjuk:

$$\frac{1}{2}\{A,A^*\} = \hat{S}^+(p)\hat{S}^-(-p) - \sum_{x\in\Lambda} S_3(x),$$
$$[C^*,A] = \sum_{x\in\Lambda} S^+(x),$$
$$\big[[C,H],C^*\big] = \sum_{x\in\Lambda}\sum_{\substack{\delta\in\Lambda\\|\delta|=1}} \big(1-\cos(p\cdot\delta)\big)S^+(x)S^-(x+\delta)$$
$$+\frac{\varepsilon}{2}\sum_{x\in\Lambda}\big(S^+(x)+S^-(x)\big).$$

Legyen

$$\begin{aligned}
c^{(\varepsilon)}(x) := \langle S^+(0)S^-(x)\rangle^{(\varepsilon)},\ m^{(\varepsilon)} &= \langle S_3(x)\rangle^{(\varepsilon)},\\
\eta^{(\varepsilon)} = \langle S^+(x)\rangle^{(\varepsilon)} &= \langle S^-(x)\rangle^{(\varepsilon)},\\
r^{(\varepsilon)} = \frac{1}{|\Lambda^2|}\sum_{x,y\in\Lambda}\langle S^+(x)S^-(y)\rangle^{(\varepsilon)} &= \frac{1}{|\Lambda|}\hat{c}^{(\varepsilon)}(p=0).
\end{aligned}$$

A Bogoljubov-egyenlőtlenségbe ezeket behelyezve és kihasználva a

$$\langle S^+(x)S^-(x+\delta)\rangle^{(\varepsilon)} \leq s(s+1)$$

egyenlőtlenséget (ami lényegében megint egy Schwarzból adódik), azt kapjuk hogy

$$\hat{c}^{(\varepsilon)}(p) - m^{(\varepsilon)} \geq \frac{1}{\beta}\frac{(\eta^{(\varepsilon)})^2}{D(p)s(s+1)+\varepsilon\eta^{(\varepsilon)}}.$$

Az egyenlőtlenség mindkét oldalára alkalmazva a $|\Lambda|^{-1}\sum_{p\in\Lambda^*\setminus\{0\}}\cdots$ összegzést a termodinamikai limeszben azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
&\lim_{\Lambda\nearrow\mathbb{Z}^d}\left(\langle S^+(0)S^-(0)\rangle_\Lambda^{(\varepsilon)} - r_\Lambda^{(\varepsilon)} - m_\Lambda^{(\varepsilon)}\right)\\
&\qquad\geq \frac{\left(\eta^{(\varepsilon)}\right)^2}{\beta}\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{(-\pi,\pi]^d}\frac{1}{s(s+1)D(p)+\varepsilon\eta^{(\varepsilon)}}
\end{aligned}$$

Világos, hogy a bal oldal korlátos: kisebb mint $s(s+1)$, ε-ban egyenletesen. Viszont, ha $\lim_{\epsilon\to 0}\eta^{(\varepsilon)} \neq 0$, akkor egy- és két dimenzióban jobb oldal felrobban az $\varepsilon \to 0$ limeszben, ami nyilvánvaló ellentmondás. Következik, hogy egy és két dimenzióban, minden véges β-ra

$$\lim_{\epsilon\to 0}\eta^{(\varepsilon)} = 0$$

□

A fejezethez tartozó irodalom: [21], [23], [27], [4], [15], [17], [16]

Irodalomjegyzék

[1] Balázs M, Tóth B.: Valószínűségszámítás 1. online

[2] Baxter R.: Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. *Academic Press*, London 1982.

[3] Bognár-Mogyoródi-Prékopa-Rényi-Szász: Valószínűségszámítás feladatgyűjtemény. *Tankönyvkiadó*, Bp. 1974.

[4] Dyson F.J., Lieb E.H. and Simon B.: Phase transitions in quantum spin systems with isotropic and nonisotropic interactions. *J. Stat. Phys.* **18**: 335-383 (1978)

[5] Ellis R., Newman Ch.: *Zeitschrift für Wahrscheinlichtkeitstheorie und verw. Geb.* **44**: 117-139 (1978)

[6] Feller W.: An Introduction to Probability Theory and its Applications, vol. I. & II. *J. Wiley and Sons*, N.Y. 1968.

[7] Fröhlich, J.: Phase transitions, Goldstone bosons and topological superselection rules. *Acta. Phys. Austriaca, Suppl.* **15**: 133 (1976)

[8] Fröhlich, J.: The pure phases: Mathematical physics of phase transitions and symmetry breaking. *Bull. Am. Math. Soc.* **84**: 165-193 (1978)

[9] Fröhlich, J., Simon, B. and Spencer, T.: Infrared bounds, phase transitions and continuous symmetry breaking. *Commun. Math. Phys.* **50**: 79-85 (1976)

[10] Griffiths, R.: *Phys. Rev.* **136 A**: 437-439 (1964)

[11] Griffiths, R.: *J. Math. Phys.* **8**: 478-483 & 484-489 (1967)

[12] Griffiths, R.: *Commun. Math. Phys.* **6**: 121-127 (1967)

[13] Griffiths, R.: Rigorous results and theorems. In: Phase Transitions and Critical Phenomena. eds.: C. Domb and M.S. Green, *Academic Press*, London 1972.

[14] Kelly, D.G. and Sherman, S.: *J. Math. Phys.* **9**: 466-484 (1968)

[15] Kennedy T., Lieb E.H., Shastry B.S.: Existence of Néel order in some spin-1/2 Heisenberg antiferromagnets. *J. Stat. Phys.* **53**: 1019-1030 (1988)

[16] Koma T., Tasaki H.: Symmetry braeking in Heisenberg Antiferromagnets. *Commun. Math. Phys.* (1993).

[17] Kubo K., Kishi T.: Existence of long-range order in the XXZ model. *Phys. Rev. Letters* **61**: 2585-2587 (1988)

[18] Lamperti J.: Probability: a Survey of the Mathematical Theory. *Benjamin*, 1966.

[19] Lee, T.D. and Yang, C.N.: *Phys. Rev.* **87**: 404-409 (1952)

[20] Lee, T.D. and Yang, C.N.: *Phys. Rev.* **87**: 410-419 (1952)

[21] Lieb, E. H.: New proofs of long-range order. In: *Mathematical Problems in Theoretical Physics* Lecture Notes in Physics **80**: 59-67 (1978)

[22] Mermin, N.D.: Absence of ordering in certain classical systems. *J. Math. Phys.* **8**: 1061-1064 (1967)

[23] Mermin, N.D. and Wagner, H.: Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional Heisenberg models. *Phys. Rev. Letters* **17**: 1133-1136 (1966)

[24] Peierls, R.: *Proc. Camb. Philos. Soc.* **32**: 477-481 (1936)

[25] Reif F.: Statistical Physics; The Berkeley Physics Course vol. V. *McGraw-Hill*, 1965. (vagy bármely más *egyszerű, bevezető* stat. fiz. tankönyv)

[26] Rényi A.: Valószínűségszámítás. *Tankönyvkiadó*, Bp. 1973.

[27] Roepstorff G.: A stronger version of Bogoliubov's inequality and the Heisenberg model. *Commun. Math. Phys.* **53**: 143-150 (1977)

[28] Ruelle, D.: Statistical Mechanics: Rigorous Results. *W.A. Benjamin*, N.Y. 1969.

[29] Titchmarsh, E. C.: The Theory of Functions. 2nd edition, *Oxford University Press*, 1939.

[30] Tóth B.: Határeloszlás- és nagy eltérés tételek a valószínűségszámításban. online

[31] Tóth B.: Valószínűségszámítás 2. online