Esponenti critici ed equazione di stato critica di sistemi di spin in tre dimensioni

Martin Hasenbusch
Andrea Pelissetto
Paolo Rossi
Ettore Vicari
Massimo Campostrini

Phys. Rev. E60 (1999) 3526;

Phys. Rev. B61 (2000) 5905;

Phys. Rev. B62 (2000) 5843;

`cond-mat/0005130`.

- Introduzione
- Tecniche di alta temperatura ed IHT
- Tecniche Monte Carlo e finite-size scaling
- Risultati per gli esponenti critici
- Equazione di stato critica
- Risultati per i rapporti universali di ampiezze

Perché continuare a studiare sistemi di spin in tre dimensioni, quali Ising ed XY?

- Descrivono numerosi fenomeni critici in natura, per i quali dati sperimentali sempre più precisi sono disponibili (Nel caso di XY, alcuni dati sperimentali sono più precisi della teoria)
- Possono corrispondere a transizioni di fase (termiche) rilevanti per la fisica delle alte energie, come la transizione elettrodebole e, per $\mathrm{O}(4)$, la transizione chirale in QCD con due sapori.
- Sono l'esempio meglio compreso di fenomeni critici in tre dimensioni
- Si possono applicare e confrontare numerose tecniche teoriche (metodi di teoria di campo: svliuppo in g a d fisso, ε-expansion, ERG; metodi di reticolo: sviluppo di alta temperatura e di bassa temperatura, Monte Carlo, finite-size scaling)
- Si possono verificare alcuni concetti fondamentali per la teoria quantistica di campo, come l'universalità ed il gruppo di rinormalizzazione

L'ipotesi di universalità è fondamentale per la moderna comprensione dei fenomeni critici. È quindi molto interessante la sua verifica, teorica e sperimentale, con la massima precisione possibile.

Molti sistemi fisici tridimensionali caratterizzati da interazioni a corta distanza e da un parametro d'ordine scalare (come la densità o la magnetizzazione uniassiale) appartengono alla classe di universalità di Ising; ad esempio:

- Transizioni liquido-vapore in fluidi semplici (LV)
- Miscele binarie di fluidi (BM)
- Sistemi (anti)ferromagnetici uniassiali (MS)
- Sistemi micellari (MI)
- Transizione di deconfinamento nella teoria di gauge $\mathrm{SU}(2)$
- Transizione elettrodebole

Alcuni sistemi fisici con interazioni a corta distanza e parametro d'ordine bidimensionale (o complesso) appartengono alla classe di universalità di XY; ad esempio:

- Sistemi (anti)ferromagnetici planari
- Transizione λ di $^4\mathrm{He}$

Quest'ultima è particolarmente interessante, perché un esperimento in condizioni di microgravità ha dato risultati estremamente precisi (che possono essere ancora migliorati).

In prossimità del punto critico ($t = (T - T_c)/T_c \approx 0$), nella fase di alta temperatura (simmetrica) $t > 0$, $h = 0$

calore specifico	$C_H \approx A^+ \lvert t \rvert^{-\alpha}$
suscettività magnetica	$\chi \approx C^+ \lvert t \rvert^{-\gamma}$
lunghezza di correlazione	$\xi \approx f^+ \lvert t \rvert^{-\nu}$

Nella fase di bassa temperatura (rotta) $t < 0$, $h = 0^+$

calore specifico	$C_H \approx A^- \lvert t \rvert^{-\alpha}$
suscettività magnetica	$\chi \approx C^- \lvert t \rvert^{-\gamma}$
lunghezza di correlazione	$\xi \approx f^- \lvert t \rvert^{-\nu}$
magnetizzazione	$M \approx B \lvert t \rvert^{\beta}$

Sull'isoterma critica $t = 0$, $h \neq 0$

suscettività magnetica	$\chi \approx C^c \lvert h \rvert^{-\gamma/\beta\delta}$
lunghezza di correlazione	$\xi \approx f^c \lvert h \rvert^{-\nu/\beta\delta}$

Per $t = 0$, $h = 0$

funzione a due punti $\widetilde{G}(q) \approx D q^{\eta - 2}$

Gli esponenti sono universali, ed hanno lo stesso valore nelle due fasi; sono legati dalle relazioni di scaling e hyperscaling

$$\gamma = (2-\eta)\nu; \quad \beta\delta = \beta + \gamma; \quad 2-\alpha = d\nu;$$
$$2\beta = \nu(d-2+\eta); \quad \delta = (d+2-\eta)/(d-2+\eta).$$

Le ampiezze non sono universali, ed hanno lo valore diverso nelle due fasi; tuttavia si possono definire rapporti universali di ampiezze, che non dipendono dalla normalizzazione di H, M e T. Ad esempio, A^+/A^-, C^+/C^- ed f^+/f^- sono universali.

L'equazione di stato critica, che mette in relazione H, M e T in prossimità del punto critico, si può scrivere come

$$H = M^\delta f(x), \qquad x = tM^{-1/\beta};$$
$$H = t^{\beta\delta} F(z), \qquad z = Mt^\beta.$$

Le funzioni $f(x)$ ed $F(z)$ sono universali. Altre funzioni universali si possono ottenere dal comportamento critico della lunghezza di correlazione e dalla funzione a due punti:

$$\xi = M^{-\nu/\beta} g(x);$$
$$\widetilde{G}(q,t,M) = |t|^{-\gamma} Z(x,y), \qquad y = q|t|^{-\nu}.$$

I rapporti universali di ampiezze si possono ricavare dalle funzioni scalanti (universali) $f(x)$, $g(x)$, $Z(x,y)$ etc.

Studiamo una classe di modelli nella classe di universalità di Ising descritti dall'hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -\beta \sum_{\langle ij \rangle} \phi_i \phi_j + \sum_i V(\phi_i^2) + \sum_i h_i \phi_i,$$

dove ϕ_i è un campo scalare reale.

Calcoliamo lo sviluppo di alta temperatura HT (in potenze di β) della funzione a n punti connessa

$$\begin{aligned} G_n(x_1, \ldots, x_n) &= \left. \frac{\partial^q W[h]}{\partial h_{i_1} \ldots \partial h_{i_q}} \right|_{h=0}, \\ \exp(W[h]) &= \frac{1}{Z} \prod_i \left[\int d\phi_i \, \exp(V(\phi_i^2) + h_i \phi_i) \right] \\ &\quad \times \exp\left(-\beta \sum_{\langle ij \rangle} \phi_i \phi_j \right), \end{aligned}$$

dove la normalizzazione Z è fissata dalla condizione $W[0] = 0$.

Tramite la tecnica della linked cluster expansion abbiamo ottenuto serie di alta temperatura per $V(\phi^2)$ arbitrario al 25° ordine per la funzione a due punti sul reticolo bcc (23° sul reticolo sc), al 21° ordine per la funzione a quattro punti etc. Queste serie non sono state ancora tutte analizzate, ed i risultati pubblicati si basano su serie al 20° ordine.

Consideriamo ad esempio la suscettività magnetica; il suo comportamento critico è

$$\begin{aligned}\chi &= Ct^{-\gamma}\Big(1 + a_{0,1}t + a_{0,2}t^2 + \ldots \\ &\quad + a_{1,1}t^{\Delta} + a_{1,2}t^{2\Delta} + \ldots + a_{2,1}t^{\Delta_2} + \ldots\Big). \qquad (1)\end{aligned}$$

Mentre gli esponenti Δ, Δ_2, ... sono universali, i coefficienti a dipendono dal modello. Per le classi di universalità di Ising ed XY, $\Delta \sim 0.5$ e $\Delta_2 \gtrsim 2\Delta$.

Ci sono diverse tecniche per ricavare le proprietà critiche (γ, ...) a partire dalla serie. La presenza di correzioni confluenti (non analitiche) complica molto il problema: ad esempio un approssimante razionale (Padé) a $\mathrm{d}\ln\chi/\mathrm{d}\beta$ riproduce la singlarità dominante ma non la subdominante. Gli approssimanti integrali in linea di principio possono riprodurla, ma in pratica non funzionano bene se non si fissano β_c e Δ ("bias").

Per questa ragione, è molto utile considerare famiglie di modelli descritte da un parametro irrilevante λ, e cercare il particolare valore $\lambda^\star$ per il quale $a_{1,1} = 0$; chiameremo i modelli con $a_{1,1} = 0$ "improved". (Quest'idea è dovuta a Chen, Fisher e Nickel, negli anni '80.)

Non per ogni famiglia di modelli esiste un $\lambda^\star$, ma costruiremo alcune famiglie per le quali esiste.

Ricordiamo l'hamiltoniana

$$H = -\beta \sum_{\langle ij \rangle} \phi_i \phi_j + \sum_i V(\phi_i^2),$$

e scegliamo il reticolo sc con

$$V(\phi^2) = \phi^2 + \lambda_4 (\phi^2 - 1)^2 + \lambda_6 (\phi^2 - 1)^3;$$

fissiamo alcuni valori di λ_6, e cerchiamo il corrispondente $\lambda_4^\star$.

Una determinazione accurata di $\lambda^\star$ è cruciale per ottenere risultati a precisione molto alta. Un metodo molto efficace si basa su simulazioni Monte Carlo con tecniche di finite-size scaling. La determinazione di $\lambda^\star$ dalle serie di alta temperatura è molto meno precisa.

Consideriamo una quantità RG-invariante $\mathcal{O}$ (ad esempio il parametro di Binder $Q = \langle M^4 \rangle / \langle M^2 \rangle^2$); su un reticolo finito di dimensione L

$$\mathcal{O}^\star = \lim_{L\to\infty} \lim_{\beta\to\beta_c(\lambda)} \mathcal{O}(\beta, \lambda, L).$$

$\mathcal{O}^\star$ non dipende da λ; lo scaling implica

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\beta_c(\lambda), \lambda, L) \quad &\approx \quad \mathcal{O}^\star + a_1(\lambda) L^{-\omega} + a_2(\lambda) L^{-2\omega} + ... \\ & \qquad + b_1(\lambda) L^{-\omega_2} + ... \end{aligned}$$

con $\omega = \Delta/\nu$, $\omega_2 = \Delta_2/\nu$... Poiché
$a_1(\lambda^\star) = a_2(\lambda^\star) = ... = 0$, per $\lambda \approx \lambda^\star$

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\beta_c(\lambda), \lambda, L) \quad &\approx \quad \mathcal{O}^\star + (\lambda - \lambda^\star)(a_{11} L^{-\omega} + a_{21} L^{-2\omega} + ...) \\ & \qquad + b_1(\lambda^\star) L^{-\omega_2} + ... \end{aligned}$$

Definendo $\lambda^{\mathrm{eff}}(L)$ tramite

$$\mathcal{O}(\beta_c(\lambda^{\mathrm{eff}}(L)), \lambda^{\mathrm{eff}}(L), L) = \mathcal{O}^\star,$$

si ha

$$\lambda^{\mathrm{eff}}(L) \approx \lambda^\star - c L^{\omega - \omega_2}.$$

Per Ising, $\omega \approx 0.8$ e $\omega_2 \approx 2\omega$, quindi $\lambda^{\mathrm{eff}}(L)$ converge rapidamente a $\lambda^\star$ per $L \to \infty$. Queste quantità si possono calcolare con tecniche Monte Carlo su reticoli di medie dimensioni, con precisione molto elevata.

Consideriamo tre famiglie di modelli nella classe di Ising:

(1) $\lambda_6 = 0$: $\lambda_4^\star = 1.10(2)$ (Hasenbusch, 1999)

(2) $\lambda_6 = 1$: $\lambda_4^\star = 1.90(4)$

(3) $\exp V(\phi^2) = \delta(\phi) + e^D(\delta(\phi{+}1) + \delta(\phi{-}1))$:
$D^\star = 0.641(8)$ (Hasenbusch, 1999)

Assumiamo che gli errori sistematici dovuti alle singolarità confluenti siano fortemente ridotti lavorando a $\lambda = \lambda^\star$ (IHT).

Questa ipotesi va verificata controllando la consistenza dei risultati per le tre famiglie di modelli:

	γ	ν	η
(1)	1.23732(24+16)	0.63015(13+12)	0.0364(3+1)
(2)	1.23712(26+31)	0.63003(13+23)	0.0363(3+2)
(3)	1.23680(30+12)	0.62990(15+8)	0.0366(3+1)

(il primo errore è legato alla stabilità degli approssimanti, il secondo all'incertezza su $\lambda^\star$).

Otteniamo come risultati finali:
$\gamma = 1.2371(4)$, $\nu = 0.63002(23)$, $\eta = 0.0364(4)$,
$\alpha = 0.1099(7)$, $\beta = 0.32648(18)$, $\delta = 4.7893(22)$.

Esponenti critici della classe di universalità di Ising in tre dimensioni

IHT: serie di alta temperatura "improved"

HT: serie di alta temperatura, analisi "tradizionale" biased (Butera e Comi, 1997)

MC: Monte Carlo + finite-size scaling (Hasenbusch, 1999)

FT: metodi di teoria di campo (sviluppo perturbativo in dimensione fissata) (Guida e Zinn-Justin, 1998)

LV: transizioni liquido-vapore

BM: miscele binarie

MS: sistemi magnetici uniassiali

MI: sistemi micellari

	γ	ν	η
IHT	1.2371(4)	0.63002(23)	0.0364(4)
HT	1.2384(6)	0.6308(5)	
MC	1.2367(11)	0.6296(7)	0.0358(9)
FT	1.2396(13)	0.6304(13)	0.0335(25)
LV	1.233(10)		0.042(6)
BM	1.228(39)	0.628(8)	0.0300(15)
MS	1.25(2)	0.64(1)	
MI	1.237(7)	0.630(12)	0.039(4)

Esponenti critici della classe di universalità di XY in tre dimensioni

C'è un esperimento estremamente preciso sulla transizione λ di $^4\mathrm{He}$ (Lipa et al., 1996).

Il calcolo IHT è del tutto analogo a quello di Ising. Data l'importanza fenomenologica, stiamo ripetendo il calcolo con più precisione (IHT*).

Riportiamo per confronto altre determinazioni teoriche:
HT (Butera e Comi, 1997)
MC (Hasenbusch e Török, 1999)
FT (Guida e Zinn-Justin, 1998)

	γ	η	α
$^4\mathrm{He}$			$-0.01285(38)$
IHT	$1.3179(11)$	$0.0381(3)$	$-0.0150(17)$
IHT*	$1.3177(6)$		$-0.0146(8)$
MC	$1.319(2)$	$0.0381(4)$	$-0.0169(33)$
HT	$1.322(3)$	$0.039(7)$	$-0.022(6)$
FT	$1.3169(20)$	$0.0354(25)$	$-0.011(4)$

Notiamo una possibile discrepanza fra IHT* e l'esperimento.

Equazione di stato critica

È una relazione fra H, M e t, che scriviamo come

$$H = t^{\beta\delta} F(z), \qquad z = M t^{-\beta},$$

valida in entrambe le fasi vicino alla temperatura critica. La sua conoscenza permette di calcolare i rapporti universali di ampiezze per quantità ad impulso zero.

Per determinare $F(z)$, costruiamo sistematicamente delle rappresentazioni parametriche che soddisfano le properietà analitiche note per $M = 0$, $t > 0$ (piccolo z) e per $t = 0$, $M > 0$ (grande z).

Determiniamo i coefficienti liberi studiando lo sviluppo a piccoli campi del potenziale efficace (energia libera di Helmholtz) nella fase di alta temperatura

$$\mathcal{F}(M) = MH - \frac{1}{V} \ln Z(H).$$

Nella fase di alta temperatura, vale lo sviluppo

$$\Delta\mathcal{F} = \mathcal{F}(M) - \mathcal{F}(0) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{a_{2j}}{(2j)!} M^{2j}.$$

Rinormalizziamo (come teoria di campo) la teoria massiva: definiamo la massa m tramite il secondo momento della funzione a due punti ($\Gamma_R^{(2)}(0) = m^2 = 1/\xi^2$), il valore di aspettazione ad impulso zero del campo rinormalizzato

$$\varphi^2 = \frac{\xi^2(t, H{=}0)\, M^2(t, H)}{\chi(t, H{=}0)},$$

e g_{2j}, la costante di accoppiamento rinormalizzata a $2j$ punti ad impulso zero. Possiamo allora scrivere

$$\Delta\mathcal{F} = \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 + \sum_{j=2} m^{d-j(d-2)} \frac{1}{(2j)!} g_{2j} \varphi^{2j}.$$

Riscaliamo ancora il campo, definendo

$$\varphi = \frac{m^{(d-2)/2}}{\sqrt{g_4}} z, \qquad r_{2j} = \frac{g_{2j}}{g_4^{j-1}};$$

otteniamo finalmente

$$\Delta\mathcal{F} = \frac{m^d}{g_4} A(z), \qquad A(z) = \frac{1}{2} z^2 + \frac{1}{4!} z^4 + \sum_{j=3} \frac{1}{(2j)!} r_{2j} z^{2j}.$$

Ricaviamo il limite critico di g_4 e di r_{2j} (che è universale) dallo sviluppo IHT della funzione a $2j$ punti:

$$g_4^\star = 23.49(4), \quad r_6 = 2.048(5), \quad r_8 = 2.28(8), \quad r_{10} = -13(4).$$

Ritornando all'equazione di stato,

$$H(M,t) = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial M} = t^{\beta\delta}\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}z} = t^{\beta\delta}F(z), \qquad z = Mt^{-\beta};$$

Per soddisfare le condizioni di analiticità di Griffith ($H(M,t)$ regolare a $M=0$ per $t>0$ ed a $t=0$ per $M>0$), $F(z)$ deve essere regolare sia a $z=0$ che a $z=\infty$.

Notiamo anche che la curva di coesistenza viene mappata nel punto $z_0 = |z_0|e^{-i\pi\beta}$, $F(z_0)=0$.

Possiamo implementare le proprietà analitiche e di scaling dell'equazione di stato critica con una rappresentazione parametrica (Guida e Zinn-Justin, 1997):

$$\begin{aligned} M &= m_0 R^\beta \theta, \\ t &= R(1-\theta^2), \\ H &= h_0 R^{\beta\delta} h(\theta), \qquad h(\theta) = \theta + O(\theta^3). \end{aligned}$$

Notiamo la corrispondenza

$$\begin{aligned} \theta = 0 &\longrightarrow t > 0, M = 0; \\ \theta = 1 &\longrightarrow t = 0; \\ \theta = \theta_0,\ h(\theta_0) = 0 &\longrightarrow t < 0, M = M_0, \end{aligned}$$

dove θ_0 è il primo zero positivo di $h(\theta)$. Le proprietà analitiche sono riprodotte se $h(\theta)$ è analitica nell'intervallo $[0, \theta_0]$.

Scriviamo

$$
\begin{aligned}
z &= \rho\,\theta^2(1-\theta^2)^{-\beta}, \\
h(\theta) &= \rho^{-1}(1-\theta^2)^{\beta\delta}F(z(\theta)).
\end{aligned}
$$

Il caso di Ising corrisponde alla rottura di una simmetria discreta; questo implica che θ_0 è uno zero semplice di $h(\theta)$. Approssimiamo $h(\theta)$ con un polinomio (dispari); ne fissiamo i coefficienti dallo sviluppo a piccoli z di $F(z)$.

ρ è un parametro libero arbitrario, ma diventa rilevante quando approssimiamo $h(\theta)$. Lo usiamo per ottimizzare l'approssimazione; nel caso di Ising, lo possiamo ricavare da una condizione di stazionarietà globale.

Dai valori di γ, ν, r_6, r_8, ... ricavati con l'IHT otteniamo approssimazioni successive ad $h(\theta)$. Da queste ricaviamo i rapporti universali di ampiezze, e scegliamo l'approssimazione migliore, che risulta essere un polinomio di settimo grado (con tre coefficienti liberi).

Dalle ampiezze introdotte precendentemente, possiamo ricavare molti rapporti invarianti; fra i più interessanti abbiamo: $U_0 = A^+/A^-$, $Q_c = B^2(f^+)^3/C^+$, $U_\xi = f^+/f^-$.

Riportiamo anche altre stime teoriche:

HT+LT: HT+sviluppo di bassa temperatura (Liu e Fisher, 1989; Fisher e Zinn, 1998)

MC: Monte Carlo (Caselle e Hasenbusch, 1997; Hasenbusch e Pinn, 1998; Runge et al., 1994)

FT: metodi di teoria di campo (Larin et al., 1998; Bagnuls et al., 1987; Münster et al., 1994)

	U_0	Q_c	U_ξ
IHT	0.530(3)	0.3330(10)	1.961(7)
HT+LT	0.523(9)	0.324(6)	1.96(1)
MC	0.560(10)	0.328(5)	1.95(2)
MC	0.550(12)		2.06(1)
FT	0.540(11)	0.331(9)	2.013(28)
BM	0.56(2)	0.33(5)	1.93(7)
MS	0.51(3)		1.92(15)
LV	0.538(17)	0.35(4)	

Il caso di XY corrisponde alla rottura di una simmetria continua; questo implica che θ_0 è uno zero doppio di $h(\theta)$; parametrizziamo dunque

$$h(\theta) = \theta(1 - \theta^2/\theta_0^2)(1 + c_2\theta^2 + c_4\theta^4 ...)$$

Fissiamo ρ imponendo la corretta forma della singolarità di Goldstone ($h(\theta) \approx (\theta_0 - \theta)^2$ per $\theta \to \theta_0$); fissiamo θ_0, c_2, ... dallo sviluppo a piccoli z di $F(z)$.

Il rapporto più importante è A^+/A^-, che è misurato nell'esperimento su $^4\mathrm{He}$.

Il valore di A^+/A^- ottenuto dall'equazione di stato è fortemente correlato al valore di α. IHT + $^4\mathrm{He}$ è la stima ottenuta usando come input il valore sperimentale di α.

Riportiamo per confronto altre determinazioni teoriche.

	A^+/A^-	
$^4\mathrm{He}$	1.054(1)	(Lipa et al., 1996)
IHT + $^4\mathrm{He}$	1.055(3)	
IHT*	1.063(4)	
FT	1.056(4)	(Larin et al., 1998)
ε-expansion	1.029(13)	(Bervillier, 1986)

Conclusioni

Lo sviluppo di alta temperatura di modelli "improved" consente di calcolare con grande precisione le quantità universali che caratterizzano il comportamento critico nella fase simmetrica (esponenti critici, potenziale efficace).

L'equazione di stato critica può essere ricostruita a partire dalla fase simmetrica tramite opportuni schemi di approssimazione. Questo permette di calcolare molti rapporti universali di ampiezze.

Nel caso di XY, l'esistenza di risultati sperimentali estremamente precisi ($\alpha = -0.01285(38)$, $A^+/A^- = 1.054(1)$) rende interessante raffinare la precisione del calcolo teorico. Otteniamo $\alpha = -0.0146(8)$, $A^+/A^- = 1.063(4)$.