

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

Modello di tipo dimero e applicazione al modello di Ising

Relatore:
Prof.ssa
Simonetta Abenda

Presentata da:
Ludovico Furlanetto

Anno Accademico 2023/2024

Abstract

In questo elaborato viene presentato il modello di tipo dimero nella sua formulazione classica, arrivando a giustificare la formula per la funzione di partizione, dell'energia libera e delle misure di probabilità. Infine viene presentata la connessione tra il modello di tipo dimero e il modello di Ising in assenza di campo magnetico esterno, che rappresenta un importante risultato per entrambi i modelli

Indice

1	Nozioni preliminari	3
1.1	Grafi	3
1.2	Matchings	6
1.3	Height function	6
2	Il modello di tipo dimero	9
2.1	Funzione di partizione	9
2.1.1	Grafo finito	10
2.1.2	Grafo infinito	14
2.2	Energia Libera	17
2.2.1	Polinomio caratteristico	17
2.2.2	Energia libera	19
2.3	Misure	20
2.3.1	Grafo finito	20
2.3.2	Grafo infinito	21
2.3.3	Misura di Gibbs ergodica	22
3	Relazione con il modello di Ising	25
3.1	Poligoni di Ising	26
3.2	Il reticolo espanso	27
3.3	Reticolo terminale	29
3.4	Relazione tra configurazione di dimeri su L^Δ e poligoni di Ising	30
3.5	Energia libera su reticolo decorato	31

Introduzione

La meccanica statistica è la branca della fisica che utilizza la statistica e la teoria della probabilità per lo studio del comportamento meccanico e termodinamico di sistemi composti da un gran numero di particelle. Uno degli strumenti fondamentali per ottenere informazioni utili da un modello di questo genere è la funzione di partizione che incapsula gran parte del comportamento del sistema, quando questo si trova all'equilibrio termodinamico. È quindi di gran interesse la ricerca di una formula chiusa per la funzione di partizione di ogni modello.

Il modello di tipo dimero è un modello di meccanica statistica che fu per la prima volta menzionato da Fowler e Rusbroke in un articolo del 1937. Il problema fu colto sia dalla comunità matematica sia da quella fisica, giungendo all'importante risultato della funzione di partizione negli anni '60 con il contributo di P.W.Kasteleyn [PK61] e di M.E. Fisher [MF66]. Questo tipo di modello rientra, quindi, tra i modelli esattamente risolvibili [RB85], poiché la sua funzione di partizione e correlazioni possono essere scritte in forma chiusa sotto forma di Pfaffiani.

Le applicazioni del modello però sono state delle più disparate: dalla descrizione dell'assorbimento di molecole biatomiche da parte della superficie di un cristallo, alla formazione delle opinioni, e nella sua versione quantistica alla descrizione della fisica degli stati risonanti dei legami di valenza (RVB).

Un'ultima ma importante applicazione di questo modello è la possibilità di utilizzare il modello di tipo dimero per risolvere il modello di Ising [LO44] su reticolo quadrato ed esagonale, come dimostrato da M.E. Fisher [MF66], costruendo un reticolo "decorato" e modificando in modo appropriato la costante di interazione tra due siti di spin. Questo approccio semplifica notevolmente la soluzione del modello di Ising su reticolo quadrato e su reticolo esagonale come verrà mostrato nel Cap. 3.

L'esposizione sarà così organizzata: nel Cap.1 verranno riportate delle nozioni di base sulla teoria dei grafi che sono fondamentali per comprendere il modello in quanto vi dipende pesantemente. Nel Cap. 2 verrà esposto il modello giungendo al teorema di Kasteleyn e successivamente saranno presentate delle quantità d'interesse per la meccanica statistica, come l'energia libera (utilizzando la tecnica del polinomio caratteristico) e le misure di probabilità delle configurazioni su grafo finito, infinito e una misura ergodica. Nel Cap. 3 verrà mostrato l'approccio di M.E.Fisher alla risoluzione del modello di Ising su reticolo quadrato e esagonale mediante tecniche sviluppate per il modello di tipo dimero.

Capitolo 1

Nozioni preliminari

1.1 Grafi

Poiché il modello di tipo dimero è un modello su reticolo, è necessario introdurre la nozione più generale di grafo, che è così definito:

Def. 1.1.1 (Grafo). *Un grafo G è una coppia ordinata $(V(G), E(G))$ formata da un insieme $V(G)$ di vertici e un insieme $E(G)$ di spigoli disgiunto da $V(G)$. È necessaria anche una ψ_G , detta funzione di incidenza, che associa ad ogni elemento di $E(G)$ una coppia di vertici di G . Se $e \in E(G)$, $u, v \in V(G)$ e $\psi_G(e) = u, v$ si dice che e connette u e v , u e v sono detti adiacenti e si indica con $u \sim v$. Si indica il numero di vertici e di spigoli del grafo G utilizzando la notazione $|V(G)|$ e $|E(G)|$. $|V(G)|$ viene chiamato ordine, mentre $|E(G)|$ viene chiamato dimensione del grafo. Nel caso in cui non vi siano ambiguità verrà omissso il nome del grafo nell'indicazione dell'insieme dei vertici e degli spigoli.*

È possibile rappresentare graficamente un grafo (da qui il nome) indicando ogni vertice con un punto e ogni spigolo con una linea che congiunge i due vertici tra loro adiacenti.

Es. 1. *Il grafo in Fig. 1.1 è la rappresentazione grafica del seguente grafo $G(V, E)$:*

$$V(G) = \{u, v, w, x, y\} \quad E(G) = \{a, b, c, d, e, f, g, h\}$$

con la relativa funzione di incidenza:

$$\psi_G(a) = uv \quad \psi_G(b) = vu \quad \psi_G(c) = vw \quad \psi_G(d) = wx \quad (1.1)$$

$$\psi_G(e) = vx \quad \psi_G(f) = wx \quad \psi_G(g) = ux \quad \psi_G(h) = xy \quad (1.2)$$

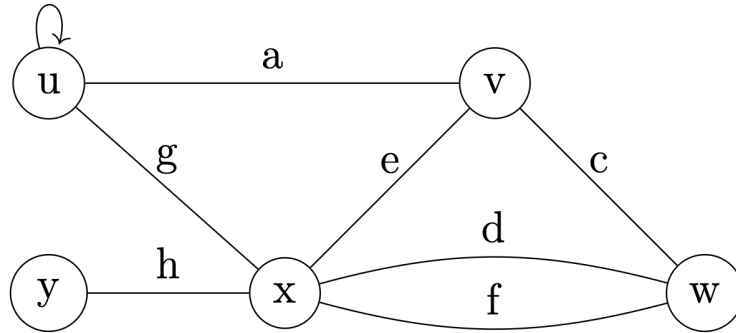


Figura 1.1: Rappresentazione del grado descritto in Es. 1

Classifichiamo ora alcune proprietà dei grafi che ci saranno successivamente utili

Def. 1.1.2 (Grafo connesso). *Un grafo $G(V, E)$ si dice connesso se esiste un percorso, cioè un insieme di spigoli, che connetta ogni coppia di vertici. Il grafo in Fig. 1.1 è connesso*

Vedremo che nel caso in cui il reticolo non sia connesso, è possibile trattare le sue componenti connesse indipendentemente, portando ad una fattorizzazione della funzione di partizione. Assumeremo d'ora in poi grafi connessi.

Per garantire l'univocità dell'interazione tra due vertici nel modello è necessario che non vi sia più di uno spigolo a connettere una qualsiasi coppia di vertici. Richiediamo quindi che il reticolo sia un grafo semplice, che è così definito:

Def. 1.1.3 (Grafo semplice). *Un grafo si dice semplice se ψ_G è iniettiva, quindi ogni coppia di vertici è connessa, al massimo, da uno spigolo. È inoltre richiesta l'assenza di "loops", cioè di spigoli che connettono un vertice con sé stesso. Il grafo in Fig. 1.1 non è semplice per via del loop del vertice u con sé stesso e degli spigoli g ed f che connettono x e w*

D'ora in poi i grafi citati verranno sempre assunti semplici.

Nel modello, l'intensità d'interazione tra vertici connessi è data da un numero che viene assegnato ad ogni spigolo, ottenendo quindi un grafo pesato che è così definito:

Def. 1.1.4 (Grafo pesato). *Un grafo $G(V, E)$ si dice pesato se esiste $\nu : e \in E(G) \rightarrow \mathbb{R}$. Nel caso in cui $v \not\sim u$, $\nu(vu) = 0$*

È necessario ora introdurre uno strumento che ci permetta di ottenere delle informazioni su un grafo, utilizzando gli strumenti dell'algebra lineare. Questo strumento è la matrice di adiacenza che viene così definita:

Def. 1.1.5 (Matrice d'adiacenza). *La matrice di adiacenza $A(G)$ di un grafo $G(V, E)$ è la matrice $|V| \times |V|$ così definita:*

$$A_{ij} = \begin{cases} 0 & v_i \not\sim v_j \\ 1 & v_i \sim v_j \end{cases}$$

Oss. 1. *Nel caso in cui $G(V, E)$ sia un grafo pesato è necessario sostituire il peso dello spigolo all'interno della matrice. Quindi $A_{ij} = \nu(v_i w_j)$*

In 2.1.1 si otterrà un risultato più semplice per la funzione di partizione del modello, nel caso in cui il grafo sia bipartito. Ne diamo quindi ora la definizione:

Def. 1.1.6 (Grafo bipartito). *Un grafo $G(V, E)$, si dice bipartito se è possibile suddividere V in due sottoinsiemi V_B (vertici neri) e V_W (vertici bianchi) tali che $V_B \cap V_W = \emptyset$ e $V_B \cup V_W = V$. È inoltre richiesto che ogni $e \in E$ connetta vertici di diverso colore*

Es. 2. *Il grafo in Fig. 1.3 è un esempio di grafo bipartito. I vertici appartenenti a V_B sono rappresentati in nero (black), mentre i vertici appartenenti a V_W sono rappresentati in bianco (white)*

Oss. 2. *Nel caso in cui il grafo sia bipartito, la matrice di adiacenza è della forma:*

$$A = \begin{pmatrix} 0_{bb} & B \\ B^T & 0_{ww} \end{pmatrix}$$

È possibile quindi scriverla in forma più compatta indicizzando le colonne con i vertici neri e le righe con i vertici bianchi, ottenendo $A = B^T$

Def. 1.1.7 (Grafo duale). *Sia $G(V, E)$ un grafo. Indichiamo con G^* il grafo formato, a partire da G , inserendo un vertice per ogni faccia di G e connettendo due vertici di G^* se le rispettive facce di G sono separate da uno spigolo di G*

Def. 1.1.8 (Spanning tree). *Si definisce spanning tree di $G(V, E)$ il grafo $T(V, F)$ con $F \subseteq E$ tale che per ogni $(v, w) \in V \times V$, esista un unico cammino formato da $e \in F$. I vertici di grado 1 vengono chiamati "foglie" tranne il vertice di partenza che viene chiamato "radice"*

Def. 1.1.9 (Grafo planare). *Un grafo $G(V, E)$ si dice planare se può essere rappresentato su un piano senza che spigoli diversi si intersechino*

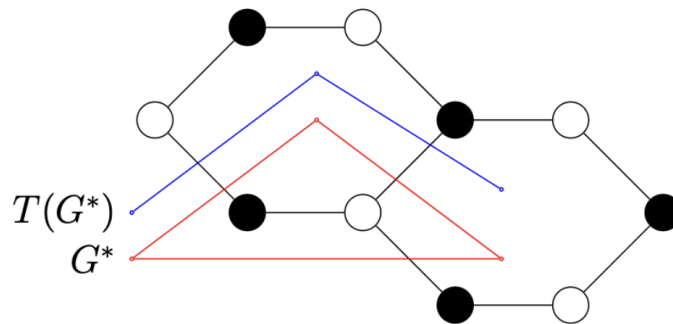


Figura 1.2: Rappresentazione del duale e dello spanning tree del duale del grafo doppio esagonale

1.2 Matchings

Def. 1.2.1 (Matching). Sia $G(V, E)$ un grafo. Definiamo matching di G , l'insieme $M \subseteq E$ tale che ogni $v \in V(G)$ è adiacente al massimo ad un $m \in M$. $m \in M$ viene chiamato dimero. Nel caso in cui ogni $v \in V(G)$ sia adiacente ad esattamente un $m \in M$, M viene detto perfect matching di G . È possibile riferirsi ad un perfect matching utilizzando anche il termine “configurazione di dimeri”. Indichiamo l'insieme dei perfect matchings di G con $\mathcal{M}(G)$

G non ammette perfect matchings se:

- ha un numero dispari di vertici
- ha vertici isolati (cioè che non sono adiacenti a nessun altro vertice)

Oss. 3. Se $G(V, E)$ è bipartito, affinché ammetta un perfect matching è necessario che $|V_B| = |V_W|$.

Per evitare trivialità assumere che per ogni spigolo di $E(G)$, vi sia sempre un perfect matching di G che lo contiene ed uno che non lo contiene.

1.3 Height function

L'height function è un utile strumento per analizzare alcune proprietà dei perfect matchings di un grafo. Prima di definirla è necessario introdurre il concetto di flusso:

Def. 1.3.1 (Flusso). Si definisce flusso la funzione $\omega : e \in \vec{E} \rightarrow \mathbb{R}$. Notare che viene utilizzato \vec{E} , che è l'insieme di spigoli orientati generato da E , formato prendendo le due

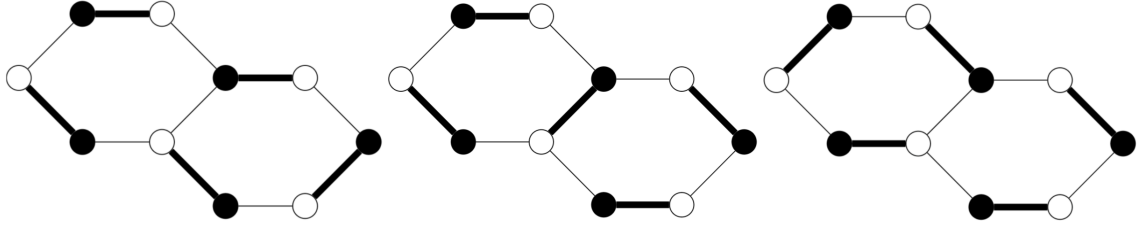


Figura 1.3: Rappresentazione dei 3 perfect matchings del grafo a doppio esagono. I perfect matching sono rappresentati con linee più spesse

orientazioni possibili di ogni spigolo di E .

La divergenza del flusso in un vertice è data da:

$$\operatorname{div} \omega(u) = \sum_{v \sim u} \omega(u, v) - \sum_{v \sim u} \omega(v, u)$$

Nel caso in cui il grafo sia bipartito è possibile definire il flusso in funzione di un certo perfect matching $M \in \mathcal{M}(G)$ come di seguito:

$$\omega^M(wb) = \begin{cases} 0 & wb \notin M \\ 1 & w \rightarrow b \\ -1 & b \rightarrow w \end{cases}$$

Oss. 4. È utile notare che, con questa definizione, $\operatorname{div} \omega(w) = 1, \forall w \in V_W$ e $\operatorname{div} \omega(b) = -1, \forall b \in V_B$

Def. 1.3.2 (Height function). Sia $M_0 \in \mathcal{M}(G)$ un perfect matching di riferimento con il relativo flusso ω^{M_0} . Sia f_0 una faccia di G (generalmente la faccia esterna per un grafo finito) e sia $M \in \mathcal{M}(G)$ un perfect matching di G . Definiamo quindi $h^M(f_0) \equiv 0$ e per qualsiasi altra faccia f_1 si consideri il cammino γ su G^* che connette f_0 a f_1 . Indichiamo con $\{(u_1, v_1), \dots, (u_k, v_k)\}$ l'insieme degli spigoli di G attraversati da γ . Identifichiamo con u_i il vertice alla sinistra di γ e con v_i il vertice alla destra di γ . Allora:

$$h^M(f_1) - h^M(f_0) = \sum_{i=1}^k [(\omega^M(u_i, v_i) - \omega^M(v_i, u_i)) - (\omega^{M_0}(u_i, v_i) - \omega^{M_0}(v_i, u_i))]$$

Una definizione alternativa per l'height function è la seguente:

Def. 1.3.3 (Height function (alternativa)). L'height function h^M associata ad una con-

figurazione di dimeri $M \in \mathcal{M}(G)$ è una funzione a valori interi definita su G^* definita come:

$$h^M(f') - h^M(f) = \sum_{e \in C_{f \rightarrow f'}} \sigma_e (1_{e \in M} - 1_{e \in M_0})$$

Dove M_0 è una configurazione di dimeri di riferimento e f_0 è una faccia di G^* per la quale $h^M(f_0) = 0$, $C_{f' \rightarrow f}$ è un percorso tra primi vicini su G^* e σ_e è uguale a 1 se lo spigolo $e \in G$ viene attraversato con il vertice bianco sulla destra, e vale -1 altrimenti

Oss. 5. L'height function è indipendente dal percorso γ scelto, ma questo è vero solo se il grafo è planare. Se, ad esempio, il grafo fosse embedded in un toro, allora l'height function sarebbe della forma $h^M(f_1) - h^M(f_0) = n_1 \Delta_1 + n_2 \Delta_2$ con Δ_1, Δ_2 dipendenti dalla configurazione di dimeri, mentre n_i è il winding number del percorso $C_{f_0 \rightarrow f_1}$ nella direzione e_i

Capitolo 2

Il modello di tipo dimero

2.1 Funzione di partizione

Sia dato un reticolo, le configurazioni del sistema corrispondono alle configurazioni di dimeri ammissibili sul reticolo, quindi per poter costruire la funzione di partizione è necessario assegnare ad ogni configurazione del sistema un numero reale che sarà legato alla probabilità di trovare il sistema in quel determinato stato. Per fare ciò è possibile assegnare ad ogni configurazione di dimeri un peso utilizzando la seguente funzione dei pesi:

Def. 2.1.1 (Funzione dei pesi). *Sia $G(V, E)$ un grafo semplice, planare e finito. Allora possiamo definire $\nu(e) : e \in E \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ e conseguentemente il peso di un perfect matching $M \in \mathcal{M}(G)$ è dato da:*

$$\nu(M) = \prod_{e \in M} \nu(e)$$

Oss. 6. *Si evita di assegnare $\nu(e) = 0$ poiché equivarrebbe ad eliminare lo spigolo corrispondente*

La funzione di partizione è quindi la somma dei pesi di tutte le possibili configurazioni del sistema. Otteniamo quindi la seguente espressione per la funzione di partizione:

$$Z(G) = \sum_{M \in \mathcal{M}(G)} \prod_{e \in M} \nu(e) = \sum_{M \in \mathcal{M}(G)} \nu(M) \quad (2.1)$$

Oss. 7. *Nel caso in cui il peso di tutti gli spigoli sia identicamente uguale a 1, $Z(G)$ conta il numero di possibili configurazioni di dimeri. Originariamente M.E. Fisher ottenne il*

numero di configurazioni di tessere del domino con cui è possibile ricoprire un scacchiera, questo numero è pari a 12 988 816

2.1.1 Grafo finito

Per una matrice generica quadrata è possibile definire il permanente della matrice nel seguente modo:

$$\text{perm}(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \prod_{i=1}^n a_{i\sigma(i)} \quad (2.2)$$

nella quale notiamo una somiglianza con la funzione di partizione appena ottenuta. Nell' Eq. 2.2 la dimensione della matrice è n , S_n è l'insieme delle permutazioni dei vertici e a_{ij} è l'elemento nell' i -esima riga e j -esima colonna della matrice A . L'uso delle permutazioni è particolarmente vantaggioso, poiché nella produttoria non compaiono elementi di matrice appartenenti alla stessa riga o colonna. Questo fatto ci torna utile perché l'obiettivo è quello di ricondurre il termine produttoria alla definizione della funzione dei pesi; se la produttoria includesse termini appartenenti alla stessa riga/colonna, staremmo moltiplicando il peso di spigoli che sono adiacenti, cosa che non è di nostro interesse vista la definizione di configurazione di dimeri 1.2.1.

Questa sarebbe già una formula esplicita per la funzione di partizione poiché, identificando $a_{i\sigma(i)} \equiv \nu[i\sigma(i)]$:

$$\text{perm}(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \prod_{i=1}^n a_{i\sigma(i)} = \sum_{M \in \mathcal{M}(G)} \nu(M) \quad (2.3)$$

ma è un'espressione poco compatta e computazionalmente tassante da calcolare, cresce infatti come $O(n!)$.

Es. 3. Dato il grafo rappresentato in Fig. 2.1, la sua matrice dei adiacenza è:

$$A = \begin{matrix} & \begin{matrix} b_1 & b_2 & b_3 & b_4 & b_5 \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} & \begin{matrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ w_5 \end{matrix} \end{matrix} \quad (2.4)$$

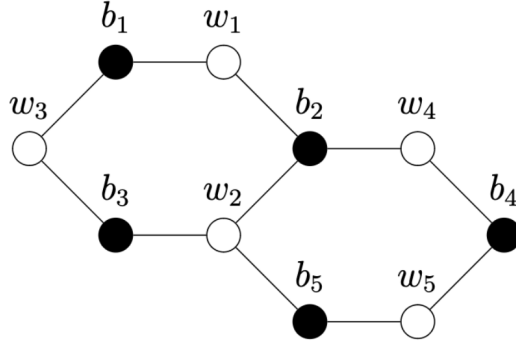


Figura 2.1: Grafo doppio esagonale con labelling dei vertici

Le uniche permutazioni che non ritornano una produttoria nulla nella formula del permanente sono: $\{1,2,3,4,5\}$, $\{1,4,3,5,2\}$, $\{3,1,2,4,5\}$ che risultano negli insiemi di spigoli: $\{b_1w_1, b_2w_2, b_3w_3, b_4w_4, b_5w_5\}$, $\{b_1w_1, b_2w_4, b_3w_3, b_4w_5, b_5w_2\}$, $\{b_1w_3, b_2w_1, b_3w_2, b_4w_4, b_5w_5\}$ che sono esattamente le configurazioni di dimeri rappresentate in Fig. 1.3

È utile notare la similitudine di questa formula con quella del determinante, che però introducendo il segno della permutazione, porta al conteggio di alcune configurazioni con il segno sbagliato

$$\det(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \text{sign}(\sigma) \prod_{i=1}^n a_{i\sigma(i)} \quad (2.5)$$

in cui $\text{sign}(\sigma) = \pm 1$. Esiste una tecnica che permette di tener conto del $\text{sign}(\sigma)$ e questo permette di calcolare la funzione di partizione, utilizzando l'algoritmo di Gauss, in $O(n^3)$. Si utilizza quindi una matrice $n \times n$ antisimmetrica, detta di Kasteleyn, così definita:

$$K(w_i, b_j) = \begin{cases} \nu(w_i b_j) & w_i \sim b_j \text{ e } w_i \rightarrow b_j \\ -\nu(w_i b_j) & w_i \sim b_j \text{ e } b_j \rightarrow w_i \\ 0 & w_i \not\sim b_j \end{cases} \quad (2.6)$$

È evidente da quest'espressione la necessità di introdurre un' orientazione del grafo che permetta di correggere la matrice di adiacenza. È fortunatamente semplice farlo, utilizzando un algoritmo definito nel seguente teorema:

Teo. 2.1.1. *Sia T uno spanning tree definito su G^* . Partendo dalle foglie di T , si orientino in modo casuale gli spigoli della faccia corrispondente f , a meno dello spigolo di G che incrocia un ramo di T . L'ultimo spigolo deve venir quindi scelto in modo tale*

che effettuando un cammino su G intorno a f , procedendo in senso orario, vi siano un numero dispari di spigoli co-orientati

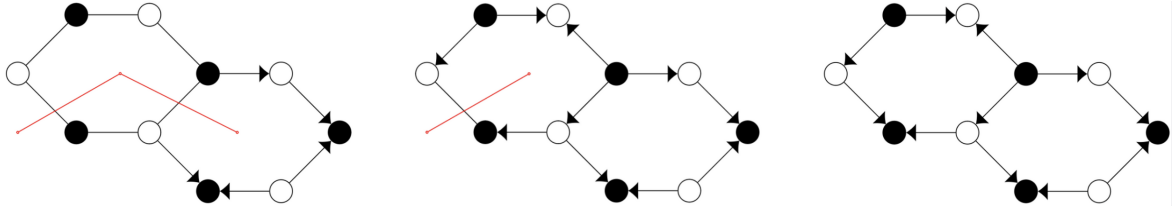


Figura 2.2: Procedimento per indurre un orientamento ammissibile. Lo spanning tree T è rappresentato in rosso

Es. 4. Per il grafo rappresentato in Fig. 2.2, con $\nu(e) \equiv 1$, la matrice di Kasteleyn corrispondente è data da:

$$K = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

e $\det(K) = 3$ come ci si aspetterebbe ricordando l'Oss. 7 e la Fig. 1.3

Tutto ciò che è stato fatto fin'ora viene riassunto nel seguente teorema dovuto a Kasteleyn e semplificato da Percus:

Teo. 2.1.2 (Funzione di partizione di un grafo finito bipartito). Sia $G(V, E)$ un grafo finito, planare, bipartito e con un'orientazione ammissibile costruita come nel Teo. 2.1.1, sia $\nu(e)$ la funzione dei pesi definita sugli spigoli e K la corrispondente matrice di Kasteleyn. Allora la funzione di partizione di G è data da:

$$Z(G) = |\det(K)|$$

Oss. 8. È necessario l'utilizzo del valore assoluto, in quando lo scambio di due righe/colonne nella matrice di Kasteleyn, corrisponde ad una riassegnazione dei nomi dei vertici, cosa che lascia invariata la funzione di partizione

Originariamente Kasteleyn risolse direttamente il caso di un grafo planare non bipartito. Per ottenere la formula generale è però necessario modificare la matrice di Kasteleyn

poiché il grafo non è più bipartito. Viene quindi così definita:

$$K(u, v) = \begin{cases} \nu(uv) & u \sim v \text{ e } uv \text{ è orientato da } v \text{ a } u \\ -\nu(uv) & u \sim v \text{ e } uv \text{ è orientato da } u \text{ a } v \\ 0 & u \not\sim v \end{cases} \quad (2.7)$$

con lo stesso orientamento descritto dal Teo. 2.1.1.

Oss. 9. K è antisimmetrica e ha dimensione $2n$ con $n = |V|$

Ne deriva quindi il teorema

Teo. 2.1.3 (Funzione di partizione generale per un grafo finito). *Sia $G(V, E)$ un grafo finito e planare e sia K la sua matrice di Kasteleyn definita come in Eq. 2.7, allora la funzione di partizione è definita come:*

$$Z(G) = |\text{Pf}(K)| = \left| \frac{1}{2^{n_n} n!} \sum_{\sigma \in S_{2n}} \text{sign}(\sigma) K_{\sigma(1)\sigma(2)} \cdots K_{\sigma(2n-1)\sigma(2n)} \right|$$

Oss. 10. *La scelta del Pfaffiano è data da alcune proprietà che possiede quando K è antisimmetrica:*

1. *Se K ha dimensione dispari allora $\text{Pf}(K) = 0$, che è consistente con il fatto che un grafo con un numero dispari di vertici non ammette perfect matchings*
2. *$\text{Pf}(BAB^T) = \det(B)\text{Pf}(A)$, che ci permette di utilizzare operazioni sulle righe/colonne della matrice per calcolarne lo Pfaffiano (utilizzando l'algoritmo di Wimmer)*
3. *$\text{Pf}(A)^2 = \det(A)$*
4. *$\text{Pf} \begin{pmatrix} 0 & K \\ K^T & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} \det(K)$, che evidenzia il fatto che, nel caso in cui il grafo sia bipartito, utilizzando lo pfaffiano si ritorna alla formula del determinante precedentemente derivata*

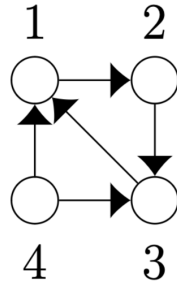


Figura 2.3: Grafo considerato nell'Es. 5

Es. 5. La matrice di adiacenza del grafo in Fig. 2.3, che non è bipartito, è:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Da cui $Z = \text{Pf}(A) = \sqrt{\det(A)} = \sqrt{4} = 2$, risultato che ci torna anche graficamente come possiamo vedere in Fig. 2.4

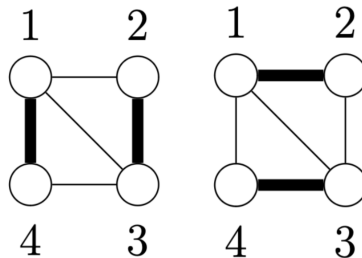


Figura 2.4: Configurazioni di dimeri del grafo in Fig. 2.3

2.1.2 Grafo infinito

Per estendere i risultati ottenuti fin'ora ad un grafo infinito si utilizza il fatto che esista un dominio fondamentale che sia rappresentativo del pattern presente in tutto il grafo. Consideriamo un grafo G infinito, periodico, planare e bipartito. Questo implica che G può essere disegnato sul piano in modo tale che \mathbb{Z}^2 operi come un isomorfismo che preserva il colore dei vertici. È quindi possibile scegliere un dominio fondamentale G_1 e due direzioni \vec{e}_1 e \vec{e}_2 che permettono di ricostruire G operando una ripetizione di G_1

nelle due direzioni scelte. Questo equivale ad avere un grafo embedded in un toro, da cui derivano le due direzioni di avvolgimento γ_1 e γ_2 . In generale si definisce G_n il quoziente di G sotto l'azione di $n\mathbb{Z}^2$, ottenendo così un grafo G_n contenente n^2 copie del dominio fondamentale.

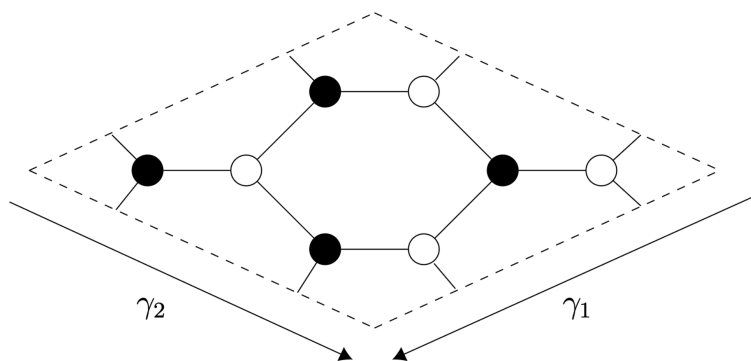


Figura 2.5: Sottografo G_2 del reticolo esagonale

È possibile scrivere la funzione di partizione di un grafo embedded in una superficie di genere g come la somma di 4^g determinanti. Nel caso del toro ($g = 1$) sorge il problema del fatto che i segni dei determinanti dipendono da $(\Delta_1, \Delta_2) \pmod 2$, con Δ_1, Δ_2 i winding number rispettivamente di γ_1 e γ_2 .

Def. 2.1.2 (Matrici di Kasteleyn un grafo embedded in un toro). *Si definisce $K^{\theta\tau}$ con $\theta, \tau \in \{0, 1\}$, la matrice ottenuta da K moltiplicando l'elemento $K(b, w)$ per $(-1)^\tau$ se (b, w) è attraversato da γ_1 , e moltiplicando $K(b, w)$ per $(-1)^\theta$ se (b, w) è attraversato da γ_2*

L'effetto dovuto al cambio di segno degli spigoli attraversati da γ_1 è quello di cambiare il segno delle configurazioni di dimeri che hanno una variazione di height function dispari lungo il percorso di γ_1 . Il discorso è analogo per γ_2 . L'effetto sui vari determinanti è riassunti nella Tab. 2.1.2.

Questo fatto aiuta a comprendere il seguente teorema:

Teo. 2.1.4. *La funzione di partizione di un grafo embedded in un toro è data da:*

$$Z(G_n) = \frac{1}{2} \sum_{\theta, \tau \in \{0, 1\}} c_{\theta\tau} \det K_n^{\theta\tau}$$

in cui $c_{\theta\tau} = \pm 1$ dove 3 dei 4 $c_{\theta\tau}$ compaiono con lo stesso segno, mentre l'ultimo compare con segno opposto

	(0,0)	(1,0)	(0,1)	(1,1)
$\det(K_1^{00})$	+	-	-	-
$\det(K_1^{10})$	+	+	-	+
$\det(K_1^{01})$	+	-	+	+
$\det(K_1^{11})$	+	+	+	-

Tabella 2.1: Tabella riassuntiva dei cambi di segno delle matrici di Kasteleyn modificate in relazione alla variazione di height function mod 2

Nel caso del reticolo esagonale vale il seguente lemma che ci permette di lavorare con domini più grandi di quello fondamentale

Lem. 2.1.1. *Nel caso del reticolo esagonale è possibile dimostrare che:*

$$\{c_{00}, c_{10}, c_{0,1}, c_{11}\} = \begin{cases} \{-1, 1, 1, 1\} & L \text{ dispari} \\ \{1, 1, 1, -1\} & L \text{ pari} \end{cases}$$

Es. 6. *Prendendo come esempio il grafo G_2 rappresentato in Fig. 2.5, la funzione di partizione è come di seguito:*

$$K_2^{00} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad K_2^{01} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$K_2^{10} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad K_2^{11} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

E quindi essendo $L = 2$

$$Z(G_2) = \left| \frac{1}{2} (-5 - 5 - 5 + (-1) \cdot (3)) \right| = 9$$

2.2 Energia Libera

2.2.1 Polinomio caratteristico

Al fine di calcolare l'energia libera del modello, è necessario introdurre il concetto di polinomio caratteristico, che permette di scriverne una forma compatta.

Nel caso in cui il grafo sia finito, l'espressione dell'energia libera può essere calcolata facilmente come si è soliti in meccanica statistica. Il caso in cui il grafo sia infinito è di maggiore interesse e sarà quello trattato di seguito.

Utilizziamo il procedimento esposto nel capitolo precedente per creare un embedding del grafo sul toro. Sia ora K_1 la matrice di Kasteleyn del dominio fondamentale G_1 , da questa è possibile costruire una matrice di Kasteleyn alterata nel seguente modo:

$$K_1(w, b) = \begin{cases} \nu(w, b) \cdot z & \text{se } wb \text{ incrocia } \gamma_x \text{ con il vertice bianco sulla sinistra} \\ \nu(w, b) \cdot z^{-1} & \text{se } wb \text{ incrocia } \gamma_x \text{ con il vertice bianco sulla destra} \\ \nu(w, b) \cdot w & \text{se } wb \text{ incrocia } \gamma_y \text{ con il vertice bianco sulla sinistra} \\ \nu(w, b) \cdot w^{-1} & \text{se } wb \text{ incrocia } \gamma_y \text{ con il vertice bianco sulla destra} \\ \nu(w, b) & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Def. 2.2.1 (Polinomio caratteristico). *Si definisce polinomio caratteristico $P(z, w)$ del grafo G_1 :*

$$P(z, w) = \det(K_1(z, w))$$

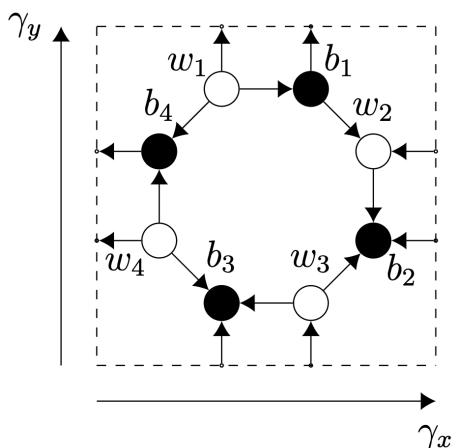


Figura 2.6: Dominio fondamentale del reticolo ottagono-quadrato

Es. 7. Vediamo un esempio concreto considerando il reticolo quadrato-ottagono rappresentato in Fig. 2.6.

In questo caso

$$K_1(b, w) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad K_1(z, w) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{z} & 1 \\ -1 & 1 & 0 & -w \\ -z & 1 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{w} & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Da cui $P(z, w) = 5 - z - \frac{1}{z} - w - \frac{1}{w}$

Per mettere in luce il collegamento tra il polinomio caratteristico e la variazione dell'height function è utile il seguente lemma:

Lem. 2.2.1.

$$P(z, w) = z^{x_0} w^{y_0} \sum_{M \in \mathcal{M}(G_1)} \nu(M) z^{h_x^M} w^{h_y^M} (-1)^{h_x^M h_y^M + h_x^M + h_y^M}$$

in cui per ogni configurazione di dimeri $M \in \mathcal{M}(G_1)$, (h_x^M, h_y^M) è la variazione dell'height function di M , si richiede che la configurazione di dimeri di riferimento M_0 sia la medesima per ogni termine nella sommatoria.

Il termine $(-1)^{h_x^M h_y^M + h_x^M + h_y^M}$ è necessario per far sì che il termine corrispondente a M in $\det(K_1(z, w))$ sia positivo solamente se $(h_x^M, h_y^M) \bmod 2 = (0, 0)$.

Enunciamo ora un teorema che permette di calcolare in modo ricorsivo il polinomio caratteristico di domini più grandi di quello fondamentale:

Teo. 2.2.1. Per ogni $n \geq 1$ e per ogni $(z, w) \in \mathbb{C}^2$, il polinomio caratteristico $P_n(z, w)$ di G_n è dato da:

$$P_n(z, w) = \prod_{\alpha_i^n = z} \prod_{\beta_j^n = w} P(\alpha_i, \beta_j)$$

Cor. 2.2.1. Per ogni $n \geq 1$ vale:

$$Z(G_n) = \frac{1}{2}(-Z_n^{00} + Z_n^{10} + Z_n^{01} + Z_n^{11})$$

dove $Z_n^{\theta\tau} = P_n((-1)^\theta, (-1)^\tau) = \prod_{\alpha_i^n = (-1)^\theta} \prod_{\beta_j^n = (-1)^\tau} P(\alpha_i, \beta_j)$

2.2.2 Energia libera

Def. 2.2.2 (Energia libera). *Si definisce energia libera per il grafo G , la quantità:*

$$F(G) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^2} \log Z(G_n)$$

Oss. 11. *Si notano le somiglianze con l'espressione solita dell'energia libera ma vi è la comparsa di un termine $\frac{1}{n^2}$. Questo è dovuto al fatto che $Z(G_n) \sim e^{cn^2}$ (ricordando che stiamo considerando grafi \mathbb{Z}^2 periodici), ed è necessario quindi un fattore di scala moltiplicativo*

Oss. 12. *Nei modelli di tipo Ising su \mathbb{Z}^d si è soliti avere la proprietà che il valore dell'energia libera nella condizione in cui $n \rightarrow \infty$ sia indipendente dal modo in cui il dominio fondamentale tenda a \mathbb{Z}^d (sotto certe ipotesi). Questa proprietà però non è presente nel modello di tipo dimero. Ciò è dovuto al fatto che nel modello di tipo dimero, l'interazione tra vertici è "hard-core" e dipende dalla presenza o meno di un dimero tra i due vertici, questo non accade per i modelli di Ising*

Possiamo quindi legare la definizione di energia libera appena enunciata con il polinomio caratteristico definito nel paragrafo precedente (Def. 2.2.1)

Teo. 2.2.2. *Se $P(z, w)$ presenta un numero finito di zeri sul toro unitario $\mathbb{T}^2 = \{(z, w) \in \mathbb{C}^2 : |z| = |w| = 1\}$ allora:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^2} \log Z(G_n) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\mathbb{T}^2} \log |P(z, w)| \frac{dz}{z} \frac{dw}{w}$$

Dimostrazione. (Sketch)

Siccome: $Z_n^{\theta\tau} \leq Z(G_n)$ e dato che $-Z_n^{00} \leq Z_n^{10} + Z_n^{01} + Z_n^{11}$ per via dei coefficienti $c_{\theta\tau}$, possiamo dire che:

$$\max_{\theta, \tau = \{0,1\}} Z_n^{\theta\tau} \leq Z(G_n) \leq 3 \max_{\theta, \tau = \{0,1\}} Z_n^{\theta\tau}$$

È quindi possibile stimare l'energia libera effettuando il limite su $\frac{1}{n^2} \log(\max Z_n^{\theta\tau})$.

Utilizzando il Teo. 2.2.1 possiamo scrivere:

$$\frac{1}{n^2} \log Z_n^{00} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{(2\pi)^2}{n^2} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{k=0}^{n-1} \log P(e^{i\frac{2\pi j}{n}}, e^{i\frac{2\pi k}{n}})$$

e analogamente per gli altri termini di $Z_n^{\theta\tau}$, la cui somma può essere approssimata con la formula presente nell'enunciato del teorema □

Es. 8. Nel caso del reticolo quadrato-ottagono l'energia libera è della forma:

$$F(G) = -\frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\mathbb{T}^2} \log \left| 5 - z - \frac{1}{z} - w - \frac{1}{w} \right| \frac{dz}{z} \frac{dw}{w}$$

2.3 Misure

2.3.1 Grafo finito

Sia G un grafo finito e bipartito allora è possibile esprimere la probabilità di trovare un set di spigoli $\{e_1, \dots, e_k\}$ in una configurazione di dimeri di G . Questo risultato è espresso nel teorema

Teo. 2.3.1. La probabilità $\mu(e_1, \dots, e_k)$ di trovare gli spigoli $\{e_1, \dots, e_k\}$ in una configurazione di dimeri rispetto alla misura di Boltzmann μ è:

$$\mu(e_1, \dots, e_k) = \left| \left(\prod_{i=1}^k K(w_i, b_i) \right) \det_{1 \leq i, j \leq k} K^{-1}(b_i, w_j) \right|$$

Questa formula va letta nel modo seguente: si deve calcolare la matrice inversa di K e successivamente si deve calcolare il determinante del minore di K^{-1} contenente solamente le righe corrispondenti a w_1, \dots, w_k e le colonne corrispondenti a b_1, \dots, b_k . Da notare che nella matrice inversa gli indici sono scambiati, che sarebbe equivalente ad indicizzare le colonne con i vertici bianchi e le righe con i vertici neri

Es. 9. Riprendiamo in esame il caso del grafo riportato in Fig. 2.7 in cui si è assunto $\nu(e) \equiv 1$ per ogni spigolo

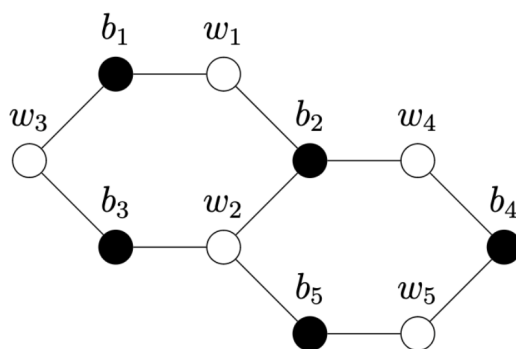


Figura 2.7:

$$K^{-1} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -2 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ -2 & 1 & 2 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

Ad esempio possiamo calcolare le probabilità:

$$\mu(w_1 b_1) = |K^{-1}(w_1 b_1)| = \frac{2}{3}$$

infatti dalla Fig. 1.3 risulta chiaro che lo spigolo $w_1 b_1$ è presente in 2 dei 3 perfect matchings.

$$\mu(w_1 b_1, w_2 b_3) = \left| \det \begin{pmatrix} K^{-1}(1, 1) & K^{-1}(3, 1) \\ K^{-1}(1, 2) & K^{-1}(3, 2) \end{pmatrix} \right| = \left| \frac{1}{9} \det \begin{pmatrix} -2 & -2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \right| = 0$$

Questo risultato torna anche graficamente, poiché lo spigolo $w_1 b_1$ e lo spigolo $w_2 b_3$ non sono mai presenti contemporaneamente in un perfect matching

2.3.2 Grafo infinito

Il risultato può essere generalizzato ad un grafo infinito mediante una simile espressione che però viene complicata dalla presenza delle matrici $K_n^{\sigma\tau}$ e dalle loro inverse che possono essere ottenute mediante integrazione dell'inverso del polinomio caratteristico. Gli zeri del polinomio caratteristico potrebbero creare dei problemi nell'integrazione ma si può dimostrare che prendendo una sottosuccessione in n delle matrici $K_n^{\sigma\tau}$ l'integrale converge. Otteniamo quindi l'espressione per la statistica locale di un grafo infinito per mezzo del seguente teorema:

Teo. 2.3.2. *Sia dato un reticolo bipartito, sia $\{e_1 = b_1 w_1, \dots, e_k = b_k w_k\}$ un sottoinsieme di spigoli di G . Allora esiste una misura di probabilità unica μ su $(\mathcal{M}(G), \sigma(A))$, in cui $\sigma(A)$ è il più piccolo sigma-field contenente gli spigoli del sottoinsieme di interesse. La misura di probabilità è data quindi da:*

$$\mu(e_1, \dots, e_k) = \left(\prod_{i=1}^k K(w_i, b_i) \right) \det(K^{-1}(b_i, w_j)_{1 \leq i, j \leq k})$$

dove K è la matrice di Kasteleyn associata al grafo G , assumendo che b e w siano nello stesso dominio fondamentale:

$$K^{-1}(b, w + (x, y)) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\mathbb{T}^2} \frac{Q_{bw}(z, w)}{P(z, w)} z^x w^y \frac{dw dz}{d z}$$

in cui $Q_{\mathbf{bw}}(z, w)$ è l'elemento (\mathbf{b}, \mathbf{w}) della matrice aggiunta di $K_1(z, w)$. È un polinomio in z, w, z^{-1}, w^{-1}

2.3.3 Misura di Gibbs ergodica

Una misura di Gibbs ergodica è una misura di Gibbs che è invariante per traslazioni, quindi la misura di un sottoinsieme A di $\mathcal{M}(G_n)$ è invariante rispetto all'azione dell'isomorfismo Z^2 , ed è ergodica quindi $\mu(A) = \{0, 1\}$. Introduciamo il concetto di “slope” (s, t) che è così definita:

$$\begin{cases} s &= \mathbb{E}_\mu[h(v + (1, 0)) - h(v)] \\ t &= \mathbb{E}_\mu[h(v + (0, 1)) - h(v)] \end{cases}$$

In cui s e t sono il valore di aspettazione della variazione dell'height function nelle due direzioni ortogonali in cui il grafo è periodico.

Definiamo ora $\mathcal{M}_{s,t}(G_n)$ come l'insieme dei perfect matchings di G_n tali che la variazione dell'height function sia $(\lfloor sn \rfloor, \lfloor tn \rfloor)$, possiamo ora enunciare il seguente teorema dovuto a S. Sheffield:

Teo. 2.3.3. *Per ogni (s, t) per il quale $\mathcal{M}_{s,t}(G_n) \neq \emptyset$ per n sufficientemente grande, $\mu_n(s, t)$ converge per $n \rightarrow \infty$ a una misura di Gibbs ergodica $\mu(s, t)$ con slope (s, t) . Inoltre μ_n stessa converge a $\mu(s_0, t_0)$ dove (s_0, t_0) è il limite delle slope di μ_n . Infine, se (s_0, t_0) è interno all'insieme di (s, t) che rende $\mathcal{M}_{s,t}(G_n) \neq \emptyset$ per n sufficientemente grande, allora ogni misura di Gibbs ergodica di slope (s, t) è della forma $\mu(s, t)$ per un qualche (s, t) ; è quindi $\mu(s, t)$ l'unica misura di Gibbs ergodica di slope (s, t) .*

Per giungere alla definizione esplicita di una misura ergodica introduciamo la nozione di poligono di Newton che viene così definito:

Def. 2.3.1 (Poligono di Newton). $N(P)$ è un inviluppo convesso in \mathbb{R}^2 dell'insieme degli esponenti interi dei monomi del polinomio caratteristico $P(z, w)$ a meno di contributi dovuti al perfect matching di riferimento quindi:

$$N(P) = \text{inviluppo convesso} \{ (i, j) \in \mathbb{Z}^2 \mid z^{i+x_0} w^{j+y_0} \text{ è un monomio di } P(z, w) \}$$

In cui un inviluppo convesso è il più piccolo poligono convesso tale per cui tutti i punti dell'insieme si trovano all'interno del poligono.

Lem. 2.3.1. *Esiste una misura di Gibbs ergodica $\mu_n(s, t) \iff (s, t) \in N(P)$*

L'idea, ora, è quella di riuscire ad utilizzare dei nuovi pesi tali che le slope diverse da (s_0, t_0) vengano favorite. Questo viene richiesto per semplificare la derivazione di un'espressione esplicita per la misura di Gibbs ergodica; è inoltre richiesto che questo cambio di pesi dipenda solamente dalla variazione dell'height function sullo spigolo di cui vogliamo modificare il peso.

Introduciamo quindi le coordinate di campo magnetico $(B_x, B_y) \in \mathbb{R}^2$. Moltiplichiamo il peso degli spigoli attraversati da γ_x per $e^{\pm B_x}$ a seconda che il vertice bianco sia alla sinistra o alla destra di γ_x . Il procedimento è analogo per gli spigoli attraversati da γ_y , il cui peso deve essere moltiplicato per $e^{\pm B_y}$. La nuova funzione dei pesi così ottenuta viene chiamata $\nu_{(B_x, B_y)}$ ed è legata alla funzione dei pesi originaria dalla relazione:

$$\forall M \in \mathcal{M}(G_n) \quad \nu_{(B_x, B_y)} = \nu(M) e^{nB_x(h_x^M + x_0^n)} e^{nB_y(h_y^M + y_0^n)}$$

in cui n rappresenta il periodo di G_n e x_0^n e y_0^n rappresentano il flusso totale attraverso γ_x, γ_y rispetto ad una configurazione di dimeri di riferimento M_0 . È possibile mettere in relazione anche il polinomio caratteristico ottenuto con la funzione dei pesi alterata con il polinomio caratteristico di G_1 usando la relazione:

$$P_{(B_x, B_y)}(z, w) = P(e^{B_x} z, e^{B_y} w)$$

Possiamo quindi costruire $Z_{(B_x, B_y)}(G_n)$, la cui misura di Boltzmann $\mu_n^{(B_x, B_y)}$ ci permette, eseguendone il limite per $n \rightarrow \infty$, di ottenere la misura di Gibbs ergodica.

Utilizzando sempre l'assunzione che $P(e^{B_x} z, e^{B_y} w)$ abbia un numero finito di zeri su \mathbb{T}^2 otteniamo che:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^2} \log Z_{(B_x, B_y)}(G_n) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\mathbb{T}^2} \log |P(e^{B_x} z, e^{B_y} w)| \frac{dz}{z} \frac{dw}{w}$$

da cui il teorema

Teo. 2.3.4. *Siano $\{e_1, \dots, e_k\}$ un sottoinsieme di G . Allora esiste un'unica misura μ_{B_x, B_y} su $(\mathcal{M}(G), \sigma(A))$ tale che:*

$$\mu_{(B_x, B_y)}(e_1, \dots, e_k) = \left(\prod_{i=1}^k K_{(B_x, B_y)}(w_i, b_i) \right) \det(K_{(B_x, B_y)}^{-1}(b_i, w_j))_{1 \leq i, j \leq k}$$

dove $\sigma(A) = -\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^2} \log Z_{s,t}(G_n)$ e K_{B_x, B_y} è una matrice di Kasteleyn in cui si assume che b e w appartengano allo stesso dominio fondamentale:

$$K_{(B_x, B_y)}^{-1}(b, w + (x, y)) = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\mathcal{T}^2} \frac{Q_{bw}(e^{B_x} z, e^{B_y} w)}{P(e^{B_x} z, e^{B_y} w)} z^y w^{-x} \frac{dw}{w} \frac{dz}{z}$$

dove $Q_{bw}(z, w)$ è l'elemento (b, w) della matrice aggiunta di $K_1(z, w)$ del grafo originale

Notiamo che in realtà non vi sono cambiamenti sostanziali nella forma dell'espressione della misura rispetto a quella vista nei paragrafi precedenti.

Capitolo 3

Relazione con il modello di Ising

In questo capitolo verrà mostrata la soluzione del modello di Ising sul reticolo quadrato per mezzo di configurazioni di dimeri dovuta a M.E. Fisher [MF66].

Costruiamo il modello di Ising su un reticolo L , assegnando ad ogni spigolo un peso K_{ij} con $K_{ij} = \frac{J_{ij}}{kT}$, J_{ij} costante di interazione tra i vertici i e j , k la costante di Boltzmann e T la temperatura del sistema. La funzione di partizione in condizione di campo magnetico esterno nullo è data da:

$$Z(T, L) = \sum_{s_i = \pm 1} \exp \left[\sum_{ij} K_{ij} (s_i s_j - 1) \right]$$

in cui è stato introdotto il termine “ -1 ” al fine di ottenere che lo zero dell’energia corrisponda allo stato in cui tutti gli spin sono allineati. Da quest’espressione è possibile ricondursi per mezzo della relazione, valida per $s_i, s_j \in \{-1, 1\}$:

$$\exp(K_{ij} s_i s_j) = \cosh K_{ij} (1 + v_{ij} s_i s_j)$$

per ottenere una nuova espressione della funzione di partizione che utilizza la funzione generatrice delle configurazioni di poligoni ammissibili:

$$Z(T, L) = 2^N \left[\prod e^{-K_{ij}} \cosh K_{ij} \right] \Upsilon(v_{ij}, L)$$

con N numero di vertici del reticolo L , $v_{ij} = \tanh K_{ij}$ e

$$\Upsilon(v_{ij}, L) = \sum_{\Gamma(L)} \prod_{(lm) \subset \Gamma} v_{lm}$$

funzione generatrice delle configurazioni di poligono ammissibili.

È immediato notare la similitudine di questa espressione con l'espressione della funzione di partizione per il modello di tipo dimero definita in Eq.2.1.

L'obiettivo finale è quello di riuscire a modificare il reticolo originario ottenendo un nuovo reticolo L^Δ le cui configurazioni di dimeri siano in corrispondenza 1-1 con configurazioni di poligoni del reticolo iniziale. In realtà verrà costruita una corrispondenza 1-1 tra configurazioni di poligoni e l'assenza di una configurazione di dimeri sugli spigoli "esterni" del reticolo L^Δ , poiché se si mettessero in corrispondenza le configurazioni di poligoni con la presenza di una configurazione di dimeri, si sarebbe costretti a lavorare con un reticolo L^Δ non planare, fatto che complica i conti. Questo approccio fu per la prima volta utilizzato da Hurst e Green nel 1960 in un articolo precedente a quello di Fisher.

3.1 Poligoni di Ising

Una configurazione di poligoni, anche chiamata rappresentazione grafica a bassa temperatura, è ottenuta prendendo un sottoinsieme di spigoli del reticolo duale tale che il vertice a sinistra e a destra di questo spigolo abbiano diverso valore di spin. Viene costruita così la funzione di partizione contando il numero di coppie di vertici verticali adiacenti con spin diverso (r) e orizzontali (s) e il numero totale di coppie adiacenti verticali/orizzontali che assumiamo uguale a M . La funzione di partizione, in cui le costanti di interazione sono state assunte tutte uguali a K , assume quindi la forma:

$$Z = \exp[2K(M - 2s - 2r)]$$

Continuando con la procedura sopra descritta per ottenere i poligoni, è possibile ricondursi alla seguente forma per la funzione di partizione

$$Z = 2e^{2MK} \sum_P \exp[-2K(r + s)]$$

con la sommatoria che avviene lungo tutte le configurazioni di poligoni possibili. Una rappresentazione grafica di una possibile configurazione di poligoni è riportata in Fig. 3.1.

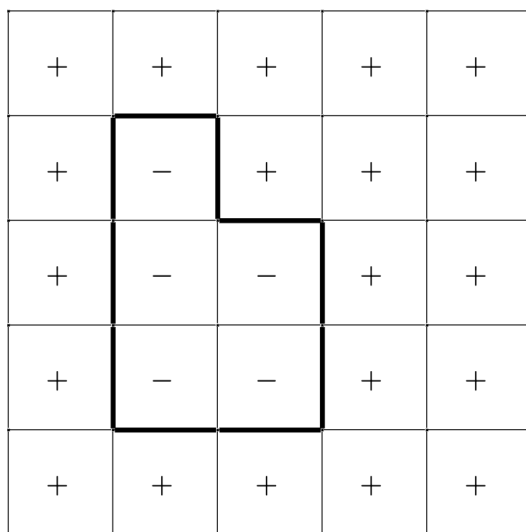


Figura 3.1: Esempio di configurazione di poligoni di spin su reticolo quadrato

È utile notare che per ogni vertice del reticolo duale, le configurazioni di spigoli di poligoni sono solamente quelle raffigurate in Fig. 3.2. Questo fatto sarà utile in seguito, poiché riduce il numero di configurazioni ammissibili e quindi rende possibile semplificare il reticolo L^Δ .

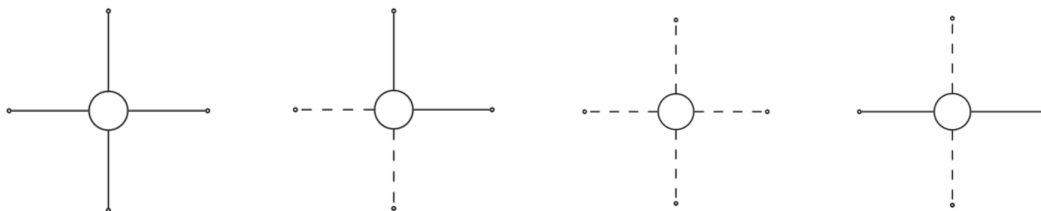


Figura 3.2: Configurazioni di poligoni ammissibili per un vertice di grado 4 (a meno di rotazioni), in linea continua sono rappresentati gli spigoli di poligoni che separano regioni a diverso valore di spin. Da notare che vi è sempre un numero pari di spigoli incidenti

3.2 Il reticolo espanso

Introduciamo ora una tecnica che ci permetterà di lavorare esclusivamente con reticoli in cui il grado di ogni vertice è pari a 1, 2 o 3. Notiamo infatti che scegliendo uno spigolo che chiamiamo $*$ (star) e facendo il limite per $K^* \rightarrow \infty$, ne deriva che i due vertici connessi

dallo spigolo $*$ sono vincolati ad avere il medesimo valore di spin, di fatto eliminando lo spigolo che li connette.

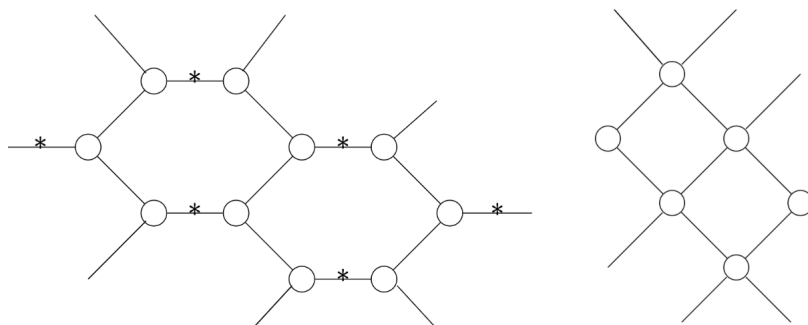


Figura 3.3: Trasformazione del reticolo esagonale nel reticolo quadrato

Grazie a questa osservazione è possibile ridurre ogni reticolo di grado $q \geq 4$ in un reticolo di grado $q \leq 3$. È sufficiente sostituire ad ogni vertice una configurazione a forma di “C” come illustrato in Fig. 3.4. È importante notare che il reticolo così costruito non inficia la planarità del reticolo originario, fattore molto importante per permetterci di usare il Teo. 2.1.2.

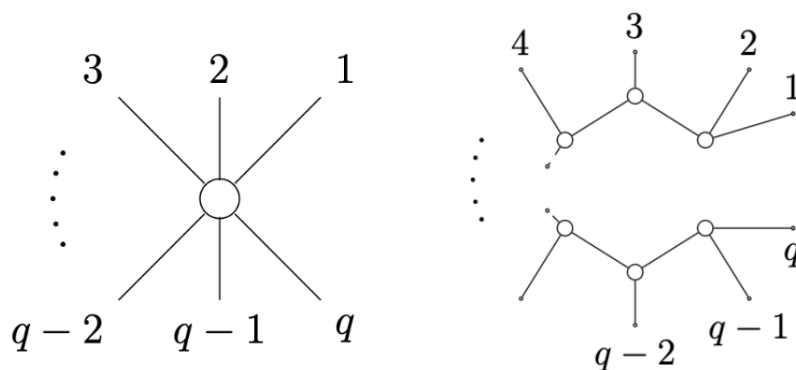


Figura 3.4: Visualizzazione della costruzione di L^E

Abbiamo costruito, quindi, un reticolo esteso detto L^E , in cui chiameremo “spigoli principali” gli spigoli originali di L , mentre “spigoli secondari” gli spigoli aggiunti per mezzo del procedimento sopra descritto e li indicheremo con $*$, in analogia a quanto fatto nella sezione precedente. Naturalmente ogni spigolo principale mantiene il suo peso originale, mentre agli spigoli secondari viene assegnato un peso $v^* = \tanh K^*$, il cui peso, nel limite per $K^* \rightarrow \infty$ diventa unitario, e quindi ininfluenza nel peso di una configurazione dei dimeri che lo contiene.

Quindi ci si può ricondurre alla funzione di partizione di Ising su un reticolo L , partendo dalla funzione di partizione sul reticolo L^E con la seguente relazione:

$$\lim_{K^* \rightarrow \infty} Z(T, L^E) = Z(T, L)$$

e la funzione di partizione con le configurazioni di poligoni tende a:

$$Z(T, L) = 2^N \left[\prod_{ij}^L e^{-K_{ij}} \cosh K_{ij} \right] \Upsilon(v_{ij}, v^* = 1, L^E)$$

in cui la produttoria viene fatta sui vertici originali di L .

3.3 Reticolo terminale

Costruiamo ora l'ultimo reticolo di cui avremo bisogno. Questo reticolo è il reticolo terminale di L^E e viene indicato con $L^\Delta = (L^E)^T$. L^Δ viene ottenuto sostituendo ad ogni vertice di grado 2 di L^E una coppia di vertici connessi da uno spigolo "interno" e ogni vertice di grado 3 con una tripletta di vertici connessi tra di loro da spigoli interni. Il grafo così ottenuto è planare e la trasformazione dei vertici di L^E riportati in Fig. 3.4 è raffigurata in Fig. 3.5

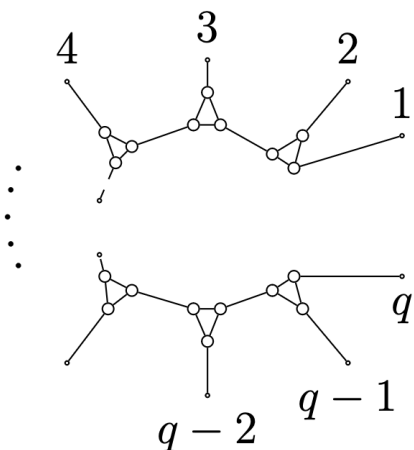


Figura 3.5: Visualizzazione della costruzione di L^Δ dal reticolo ottenuto in Fig. 3.4

Mentre la trasformazione dei vertici del reticolo quadrato in un vertice di L^E e infine in uno di L^Δ è raffigurata in Fig. 3.6.

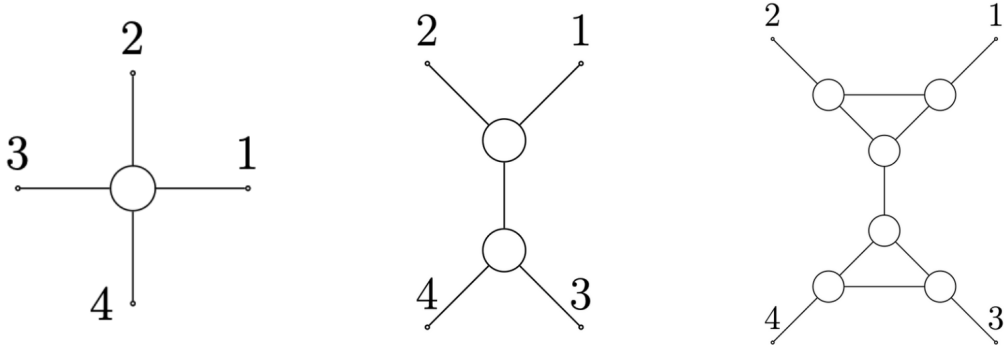


Figura 3.6: Trasformazione di un vertice nel reticolo quadrato in un vertice di L^E e infine in un vertice di L^Δ

3.4 Relazione tra configurazione di dimeri su L^Δ e poligoni di Ising

È ora possibile instaurare una relazione 1-1 tra configurazioni di poligoni su L^E e configurazioni di dimeri su L^Δ . Ad ognuna configurazione di poligoni corrisponde l'assenza di una configurazione di dimeri sugli spigoli esterni di L^Δ , questo rende possibile l'unicità della relazione. Ricordando che per un vertice di grado 4 le configurazioni di poligoni possibili sono quelle riportate in Fig. 3.2, le rispettive configurazioni su L^E sono riportate in Fig. 3.7 a sinistra mentre le configurazioni su L^Δ sono rappresentate in Fig. 3.7 a destra.

Chiamiamo $\Upsilon^\Delta(w_{ij}, w^*, w', L^\Delta)$ la funzione generatrice per la configurazione di dimeri su L^Δ . I pesi sono così definiti:

- w' se lo spigolo è interno
- w^* se lo spigolo è esterno ma corrisponde ad uno degli spigoli supplementari di L^E
- w_{ij} se lo spigolo corrisponde ad uno degli spigoli originali di L

Per completare la relazione 1-1 tra configurazioni di poligoni e assenza di configurazione di dimeri è necessario attribuire ai pesi il valore esplicito come di seguito: $w' = 1$, $w^* = (v^*)^{-1}$, $w_{ij} = (v_{ij})^{-1}$. In questo modo gli spigoli interni diventano ininfluenti visto il peso uguale ad 1, gli spigoli di L^Δ corrispondenti a spigoli supplementari di L^E assumono peso nullo nel limite di $v^* \rightarrow \infty$, gli spigoli di L hanno come peso il reciproco

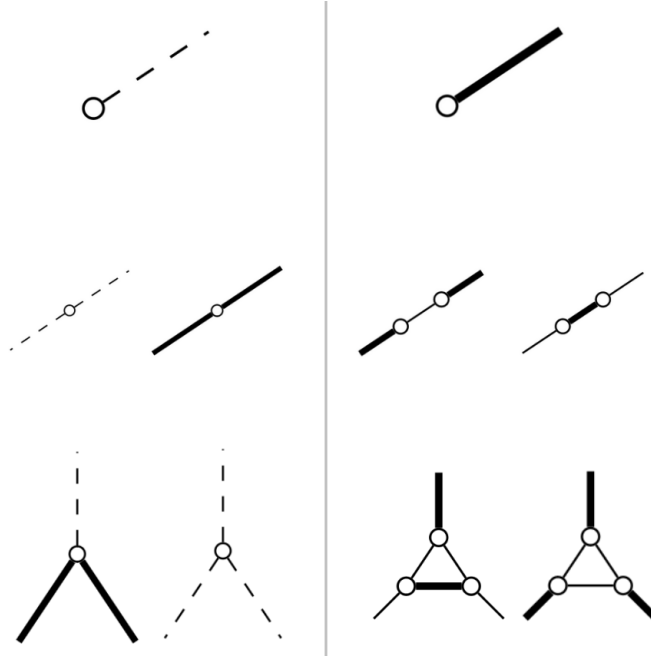


Figura 3.7: Corrispondenza tra spigoli di poligoni su L^E e configurazioni di dimeri su L^Δ , per la prima e la quarta configurazione non sono riportate le configurazioni simmetriche rispetto al vertice poiché le configurazioni su reticolo decorato posseggono la stessa simmetria

del peso originale in modo che l'assenza di una configurazione di poligoni corrisponda alla presenza di una configurazione di dimeri.

Ne deriva che il legame tra la funzione generatrice su L^E e L^Δ è dato da:

$$\Upsilon(v_{ij}, v^*, L^E) = (v^*)^{M^*} \left[\prod_{ij}^L v_{ij} \right] \Upsilon^\Delta(v_{ij}^{-1})$$

da cui possiamo scrivere

$$Z(T, L) = 2^N \left[\prod_{ij}^L \frac{v_{ij}}{(1 + v_{ij})} \right] \Upsilon^\Delta(v_{ij}^{-1}, 1, 1, L^\Delta)$$

3.5 Energia libera su reticolo decorato

Consideriamo contemporaneamente il reticolo quadrato con nm spigoli (costante d'interazione J_1 sugli spigoli orizzontali e J_2 sugli spigoli verticali) e il reticolo esagonale con

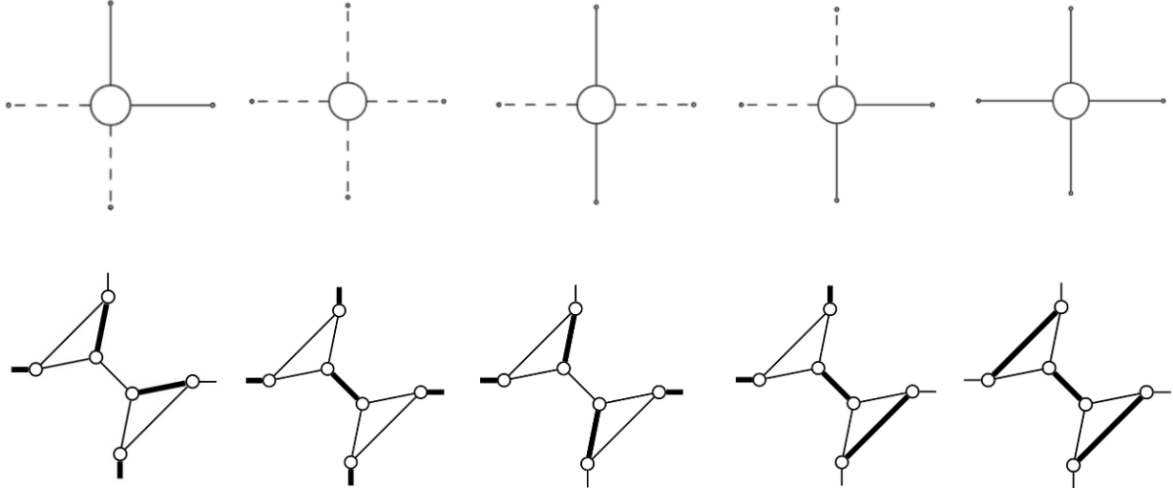


Figura 3.8: Esplicita corrispondenza tra spigoli nella configurazione di poligoni e configurazioni di dimeri su L^Δ

$2nm$ spigoli (J_1, J_2 come nel caso quadrato e J_3 per gli spigoli obliqui), utilizzeremo poi il fatto che nel limite di $J_3 \rightarrow \infty$ è possibile ricondurre il reticolo esagonale a quello quadrato come fatto in Fig. 3.3.

Il limite termodinamico dell'energia libera è dato da:

$$\begin{aligned}
 -\frac{F}{kT} &= \lim_{n,m \rightarrow \infty} \frac{1}{mn} \log Z(T, L_{mn}) \\
 &= 2 \log 2 + \log v_1 v_2 v_3 - \log(1 + v_1)(1 + v_2)(1 + v_3) + \lim_{n,m \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{1}{mn} \log \det A_{mn}
 \end{aligned}$$

La struttura della matrice A_{mn} che è ciclica a blocchi di dimensione 6×6 ci consente di scrivere l'espressione asintotica per il logaritmo del determinante di A_{mn} , giungendo ad un'espressione finale per l'energia libera, data da:

$$-\frac{F}{kT} = 2 \log 2 - \log(1 + v_1)(1 + v_2)(1 + v_3) + \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\phi_2 \log D(\phi_1, \phi_2, \phi_3)$$

in cui:

$$\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 = 2\pi$$

$$\begin{aligned}
D(\phi_1, \phi_2, \phi_3) &= 1 + v_1^2 v_2^2 + v_2^2 v_3^2 + v_3^2 v_1^2 - \\
&\quad - 2(1 - v_1^2) v_2 v_3 \cos \phi_1 - \\
&\quad - 2(1 - v_2^2) v_3 v_1 \cos \phi_2 - \\
&\quad - 2(1 - v_3^2) v_1 v_2 \cos \phi_3
\end{aligned}$$

È sufficiente porre $v_3 = 1$ per riottenere la formula di Onsager nel caso di un reticolo quadrato

$$\begin{aligned}
-\frac{F}{kT} &= \log 2 - \frac{J_1 + J_2}{kT} + \frac{1}{2(2\pi)^2} \times \\
&\quad \times \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \log (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_1 \cos \theta_1 - \sinh 2K_2 \cos \theta_2)
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Abbiamo quindi riottenuto un noto risultato del modello di Ising su reticolo quadrato ma procedendo con un approccio totalmente diverso, a supporto della correttezza di questo metodo.

Bibliografia

- [FT19] Fabio L. Toninelli, *Lecture notes on the dimer model*
- [BT14] de Tilière, Béatrice *The dimer model in statistical mechanics* Panor. Synthèses, 45[Panoramas and Syntheses] Société Mathématique de France, Paris, 2015, 1–45.
- [RK09] Kenyon, Richard *Lectures on dimers* IAS/Park City Math. Ser., 16 American Mathematical Society, Providence, RI, 2009, 191–230.
- [BM08] J. A. Bondy, U. S. R. Murty (2008), *Graph Theory*, Springer London
- [MF66] Michael E. Fisher, *On the Dimer Solution of Planar Ising Models*. J. Math. Phys. 1 October 1966; 7 (10): 1776–1781. <https://doi.org/10.1063/1.1704825>
- [RB85] R.J.Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics* https://doi.org/10.1142/9789814415255_0002
- [PK61] P. W. Kasteleyn, *The statistics of dimers on a lattice: I. The number of dimer arrangements on a quadratic lattice*, Physica 27, 1209-1225 (1961); and J. Math. Phys. 4, 287-293 (1963)
- [LO44] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A two dimensional model with order-disorder transition.*, Phys. Rev., 65(3-4):117-149, Feb 1944