

Blockspin-Konstruktion für das zweidimensionale Ising-Modell

Thomas Keuter

12. Januar 2010

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Zweidimensionales Ising-Modell	2
3	Blockspin-Konstruktion für das 1D Ising-Modell	3
4	Blockspin-Konstruktion für das 2D Ising-Modell	6
5	Quellen	10

1 Einleitung

Im Folgenden soll die Zustandssumme Z für das zweidimensionale Ising-Modell approximativ berechnet werden. Eine exakte Lösung für Z wurde 1944 von Onsager gefunden. Diese Rechnung ist allerdings sehr kompliziert. Die Zustandssumme lässt sich approximativ sehr viel einfacher durch Renormierung mithilfe einer sogenannten Blockspin-Konstruktion berechnen.

2 Zweidimensionales Ising-Modell

Für das zweidimensionale Ising-Modell werden folgende Annahmen gemacht:

- Es gibt N Spins σ_i auf einem kubischem Gitter.
- σ_i kann die Werte ± 1 annehmen.
- Es herrscht eine Nächste-Nachbar-Wechselwirkung zwischen den Spins mit einer universellen Kopplungskonstante J .

Die Energie E des Systems kann geschrieben werden als

$$E = -J \sum_{pq} \sigma_p \sigma_q. \quad (1)$$

Dabei geht die Summe über Nächste-Nachbar-Paare der Spins.

Die Zustandssumme Z ist definiert durch

$$Z = \sum_n e^{-E_n/k_B T}. \quad (2)$$

Im Eindimensionalen ergibt sich nach kurzer Rechnung

$$Z = [2 \cosh(\frac{J}{k_B T})]^N \quad (3)$$

und in 2D nach einer komplizierteren Rechnung

$$Z = [2 \cosh(\frac{2J}{k_B T}) e^I]^N \quad (4)$$

mit $I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \ln[\frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2(\phi)})]$ und $\kappa = \frac{2 \sinh[\frac{2J}{k_B T}]}{\cosh^2[\frac{2J}{k_B T}]}$.

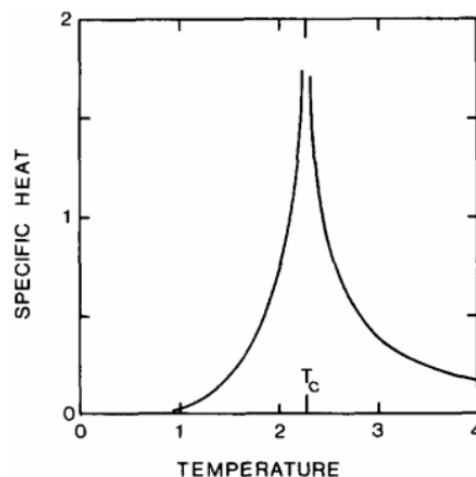


Abb. 1: Wärmekapazität C in Abhängigkeit der Temperatur T für das 2D-Ising-Modell. C ist in Einheiten von Nk_B und T in Einheiten von J/k_B dargestellt.

Aus der Zustandssumme lässt sich über $U = k_B T^2 \frac{d \ln Z}{dT}$ und $C = \frac{dU}{dT}$ die Wärmekapazität C berechnen. In 1D lässt sich kein Phasenübergang feststellen, da U und C glatte Funktionen von T sind. In 2D erhält man eine Singularität in $C(T)$, also einen Phasenübergang, bei einer kritischen Temperatur T_C (siehe Abbildung 1). T_C lässt sich aus der Bedingung $\sinh(\frac{2J}{k_B T_C}) = 1$ zu

$$\frac{T_C}{J/k_B} = 2,269 \quad (5)$$

bestimmen.

3 Blockspin-Konstruktion für das 1D Ising-Modell

Im Folgenden wird die Blockspin-Konstruktion für das 1D Ising-Modell durchgeführt, um das Verständniss für die Blockspin-Konstruktion für das 2D Ising-Modell zu erleichtern.

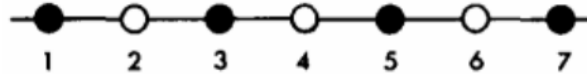


Abb. 2: Graphische Darstellung des 1D Ising-Modell. Jeder Kreis stellt einen Spin da.

Die Zustandssumme für das 1D Ising-Modell hat nach Gleichung 1 die Gestalt (siehe auch Abbildung 2)

$$Z = \sum \exp\left[\frac{J}{k_B T} (\dots \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5 \dots)\right]. \quad (6)$$

Die Summe läuft über alle möglichen Werte von σ_i . $K := \frac{J}{k_B T}$.

Zur Auswertung der Summe in Z werden die Spins in Abbildung 2 in 2 Gruppen (schwarze Kreise und offene Kreise) aufgeteilt.

Da σ_i nur in Verbindung mit σ_{i-1} und σ_{i+1} vorkommt (Nächste-Nachbar-WW), lässt sich Z schreiben als

$$\begin{aligned} Z &= \sum \dots e^{K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3)} \cdot e^{K(\sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_5)} \dots \\ &= \sum \dots e^{K(\sigma_1 + \sigma_3) \sigma_2} \cdot e^{K(\sigma_3 + \sigma_5) \sigma_4} \dots \\ &= \sum \dots \underbrace{[e^{K(\sigma_1 + \sigma_3)} + e^{-K(\sigma_1 + \sigma_3)}]}_{\text{Blockspin-Konstruktion}} \cdot [e^{K(\sigma_3 + \sigma_5)} + e^{-K(\sigma_3 + \sigma_5)}] \dots \end{aligned}$$

Die Summe über die offenen Kreise in Abbildung 2 wurde also ausgeführt, während die Summe über die schwarzen Kreise noch zu berechnen ist (Blockspin-Konstruktion).

Zur weiteren Auswertung ist eine Funktion $f(K)$ und ein K' gesucht, sodass gilt

$$e^{K(\sigma_1 + \sigma_3)} + e^{-K(\sigma_1 + \sigma_3)} \equiv f(K) e^{K' \sigma_1 \sigma_3}. \quad (7)$$

Für $\sigma_1 = \sigma_3 = \pm 1$ gilt nach Gleichung 7

$$e^{2K} + e^{-2K} = f(K) \cdot e^{K'}.$$

Für $\sigma_1 = \pm 1$ und $\sigma_3 = \mp 1$ gilt nach Gleichung 7

$$2 = f(K) \cdot e^{-K'}.$$

Damit ergibt sich nach kurzer Rechnung

$$K' = \frac{1}{2} \ln[\cosh(2K)] \quad (8)$$

$$f(K) = 2 \cosh^{1/2}(2K). \quad (9)$$

Man erhält also für Z

$$\begin{aligned} Z &= \sum \dots f(K) e^{K' \sigma_1 \sigma_3} f(K) e^{K' \sigma_3 \sigma_5} \dots \\ &= [f(K)]^{N/2} \sum e^{K'(\dots \sigma_1 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_5 + \dots)}. \end{aligned} \quad (10)$$

Die Summe in Gleichung 10 hat dieselbe Gestalt wie Summe die in Gleichung 6, mit dem Unterschied dass man nun nur noch N/2 Spins hat und die Kopplungskonstante eine andere ist. Es gilt also

$$Z(N, K) = [f(K)]^{N/2} Z\left(\frac{N}{2}, K'\right). \quad (11)$$

Z wurde renormiert.

Für große N ist $F \propto \ln Z$ extensiv, dh.

$$\ln Z(N, K) = N \cdot \zeta, \quad (12)$$

mit $\zeta = \zeta(K) \neq \zeta(N)$. Das Problem Z zu berechnen ist also äquivalent zu dem Problem ζ zu berechnen!

Aus Gleichung 11 folgt durch logarithmieren

$$\underbrace{\ln[Z(N, K)]}_{N \cdot \zeta(K)} = N \cdot \frac{1}{2} \ln[f(K)] + \underbrace{\ln[Z\left(\frac{N}{2}, K'\right)]}_{N \cdot \frac{1}{2} \zeta(K')}. \quad (13)$$

Also

$$\zeta(K) = \frac{1}{2} \ln[f(K)] + \frac{1}{2} \zeta(K'). \quad (14)$$

Setzt man in Gleichung 14 die Ausdrücke für f(K) und K ein, die sich aus Gleichung 8 und 9 ergeben, so folgt

$$\zeta(K) = \frac{1}{2} \ln[2] + \frac{1}{2} K' + \frac{1}{2} \zeta(K'). \quad (15)$$

$\zeta(K)$ ist also berechenbar, wenn K' und $\zeta(K')$ bekannt sind.

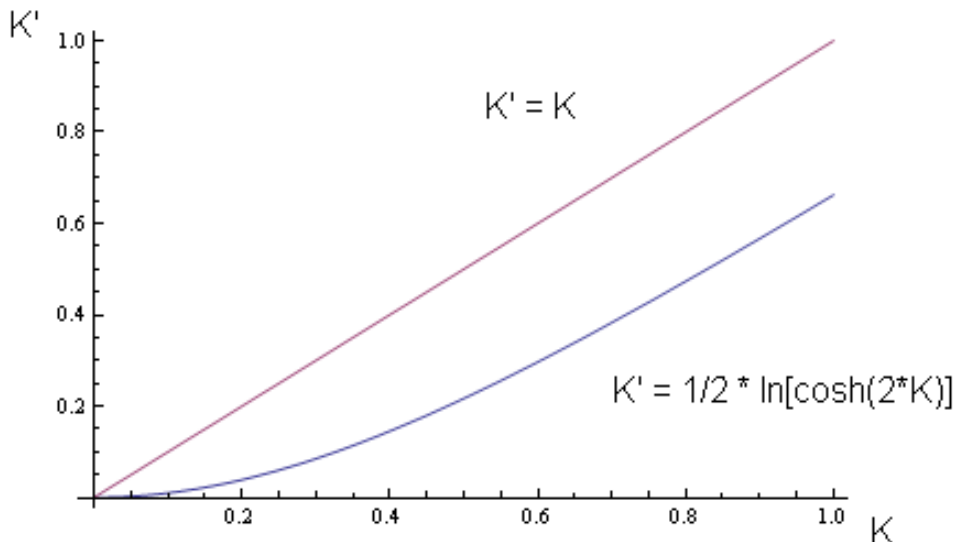


Abb. 3: $K'(K)$ aus Gleichung 8 im Vergleich mit $K'=K$

Wie in Abbildung 3 zu sehen ist, ist K' immer kleiner als K .

Zur Berechnung von $\zeta(K)$ wird eine Approximation vorgenommen (dies ist die erste Näherung die gemacht wird, bisher war alles exakt):

Falls die Wechselwirkung zwischen den Spins vernachlässigbar klein ist, gilt $Z \approx 2^N$. Zu einer kleinen Wechselwirkung gehört eine kleine Kopplungskonstante K' die zu $K' = 0,01$ gesetzt wird. Aus $\ln Z = N\zeta$ folgt $\ln[2^N] = N\zeta$ und daraus $\zeta = \ln 2$. Man erhält also für eine vernachlässigbare Wechselwirkung

$$K' = 0,01 \quad (16)$$

$$\zeta(K' = 0,01) \approx \ln 2. \quad (17)$$

Setzt man dies in Gleichung 15 und Gleichung 8 ein so erhält man

$$K = 0,100334 \quad (18)$$

$$\zeta(K) = 0,698147. \quad (19)$$

Nun kann man $K \rightarrow K'$ setzen, also

$$K' = 0,100334$$

$$\zeta(K') = 0,698147,$$

dies wieder in Gleichung 15 und Gleichung 8 einsetzen und dann iterativ weiterführen. Man erhält auf diese Weise eine Rekursionsformel für K und $\zeta(K)$ und so folgende Werte (siehe Abbildung 4):

K	$\zeta(K)$ Renormalization group	Exact
0.01	$\ln 2$	0.693 197
0.100 334	0.698 147	0.698 172
0.327 447	0.745 814	0.745 827
0.636 247	0.883 204	0.883 210
0.972 710	1.106 299	1.106 302
1.316 710	1.386 078	1.386 080
1.662 637	1.697 968	1.697 968
2.009 049	2.026 876	2.026 877
2.355 582	2.364 536	2.364 537
2.702 146	2.706 633	2.706 634

Abb. 4: $\zeta(K)$ für verschiedene Werte von K (exakte Werte berechnet aus $\ln Z = N\zeta$, Z ist für 1D bekannt)

Wie man in Abbildung 4 sehen kann, gibt es eine hervorragende Übereinstimmung der approximativ berechneten Werte für $\zeta(K)$ (und damit Z) und den exakt berechneten Werten für nahezu beliebige Werte von K .

Betrachtet man das Flussdiagramm von K (siehe Abbildung 5)



Abb. 5: Flussdiagramm von K für das 1D-Ising-Modell, Fixpunkte markiert durch \times

so sieht man, dass es 2 Fixpunkte $K=0$ (instabil) und $K=\infty$ (stabil) gibt. $K=0$ korrespondiert mit $T=\infty$ ($K:=\frac{J}{k_B T}$) und $K = \infty$ mit $T=0$. Man erhält also nur für $T=0$ und $T=\infty$ einen Phasenübergang, diese Temperaturen sind in der Natur nicht realisiert. In 1D erhält man damit keinen Phasenübergang, wie es auch schon aus der exakten Lösung von Z (Gleichung 3) zu erwarten war.

4 Blockspin-Konstruktion für das 2D Ising-Modell

In Abbildung 6 ist das zweidimensionale Ising-Modell graphisch dargestellt.

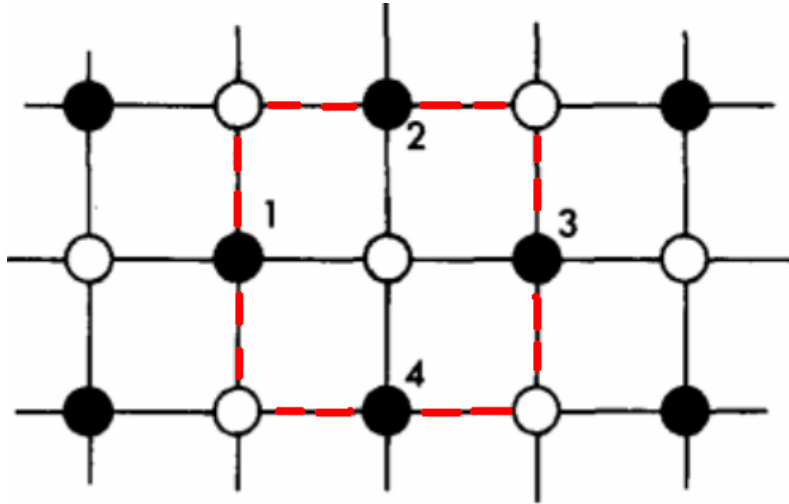


Abb. 6: Graphische Darstellung des 2D Ising-Modell. Das rot markierte Quadrat stellt einen Blockspin um einen Spin (offener Kreis) da. Die Summe in 20 wurde bereits über die offenen Kreise ausgeführt.

Analog zum 1D Ising-Modell kann man in Z die Summe über die offenen Kreise ausführen und erhält somit für die Zustandssumme

$$Z = \sum \dots \cdot \underbrace{[e^{K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} + e^{-K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)}]}_{\text{Blockspin}} \cdot \dots \quad (20)$$

Nun ist wieder eine Funktion $f(K)$ und ein K_1, K_2 und ein K_3 gesucht, sodass gilt

$$\begin{aligned} e^{K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} + e^{-K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} &\equiv \\ &\equiv f(K)e^{\frac{1}{2}K_1(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\sigma_3\sigma_4+\sigma_4\sigma_1)+K_2(\sigma_1\sigma_3+\sigma_2\sigma_4)+K_3(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4)}. \end{aligned} \quad (21)$$

Für $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 = \pm 1$ gilt nach Gleichung 21

$$e^{4K} + e^{-4K} = f(K)e^{2K_1+2K_2+K_3}$$

Für $\sigma_1 = \sigma_3 = 1, \sigma_2 = \sigma_4 = -1$ gilt nach Gleichung 21

$$2 = f(K)e^{-2K_1+2K_2+K_3}$$

Für $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = 1, \sigma_4 = -1$ gilt nach Gleichung 21

$$e^{2K} + e^{-2K} = f(K)e^{-K_3}$$

Für $\sigma_1 = \sigma_2 = 1, \sigma_3 = \sigma_4 = -1$ gilt nach Gleichung 21

$$2 = f(K)e^{-2K_2+K_3}$$

Durch Einsetzen der vier Gleichungen ineinander erhält man nach kurzer Rechnung

$$K_1 = \frac{1}{4} \ln[\cosh(4K)] \quad (22)$$

$$K_2 = \frac{1}{8} \ln[\cosh(4K)] \quad (23)$$

$$K_3 = \frac{1}{8} \ln[\cosh(4K)] - \frac{1}{2} \ln[\cosh(2K)] \quad (24)$$

$$f(K) = 2 \cosh^{\frac{1}{2}}(2K) \cosh^{\frac{1}{8}}(4K). \quad (25)$$

Die Zustandssumme lässt sich also schreiben als

$$Z = \sum \dots \cdot [f(K)e^{\frac{1}{2}K_1(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\sigma_3\sigma_4+\sigma_4\sigma_1)+K_2(\sigma_1\sigma_3+\sigma_2\sigma_4)+K_3(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4)}] \cdot \dots \quad (26)$$

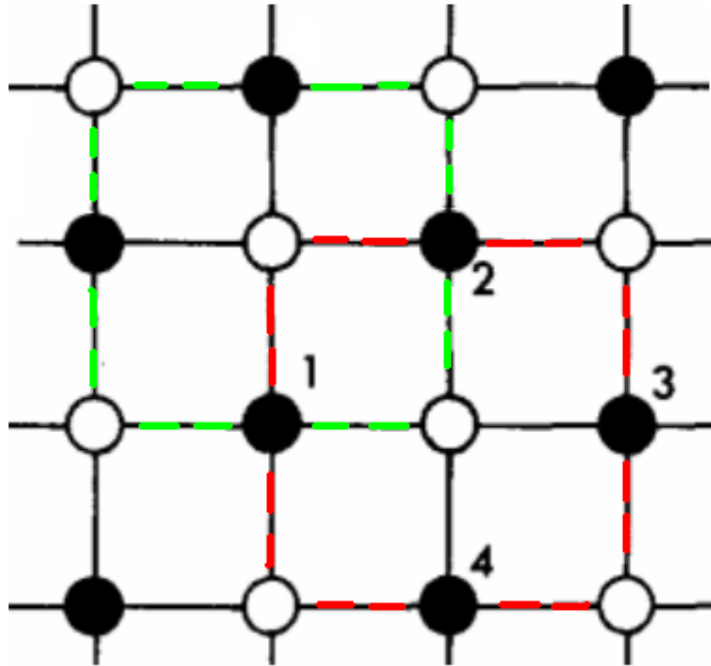


Abb. 7: Graphische Darstellung des 2D Ising-Modell wie in Abbildung 6, hier mit zwei eingezeichneten Blockspins (rotes bzw. grünes Quadrat).

Betrachtet man Abbildung 7, so erkennt man, dass der Term $e^{\frac{1}{2}K_1(\sigma_1\sigma_2)}$ in Gleichung 26 die Nächste-Nachbar-WW zwischen zwei Spins beschreibt. Entsprechend beschreibt der Term $e^{K_2(\sigma_1\sigma_3+\sigma_2\sigma_4)}$ in Gleichung 26 die Über-Nächste-Nachbar-WW zwischen zwei Spins und der Term $e^{K_3(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4)}$ in Gleichung 26 eine sogenannte Spin-Quadrat-WW.

Der Term $e^{\frac{1}{2}K_1(\sigma_1\sigma_2)}$ kommt pro offener Kreis ($\hat{=}$ Blockspin) 2 mal vor, da sich zwei Blockspins überlappen (vergleiche Abbildung 7). Das Gleiche gilt für die Terme $e^{\frac{1}{2}K_1(\sigma_2\sigma_3)}$, $e^{\frac{1}{2}K_1(\sigma_3\sigma_4)}$, $e^{\frac{1}{2}K_1(\sigma_4\sigma_1)}$. Die übrigen Terme in Gleichung 26 kommen alle nur einmal pro Blockspin vor.

Um alle Blockspins in der Zustandssumme zu berücksichtigen, kann man folgende Ersetzung in Z durchführen,

- $e^{\frac{1}{2}K_1(\sigma_1\sigma_2)} \rightarrow e^{K_1 \sum_{NN} (\sigma_p\sigma_q)}$
- $e^{K_2(\sigma_1\sigma_3+\sigma_2\sigma_4)} \rightarrow e^{K_2 \sum_{UNN} (\sigma_p\sigma_q)}$
- $e^{K_3(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4)} \rightarrow e^{K_3 \sum_{SQ} (\sigma_p\sigma_q\sigma_r\sigma_s)}$

so dass Z die Form

$$Z = [f(K)]^{\frac{N}{2}} \sum e^{K_1 \sum_{NN} (\sigma_p\sigma_q) + K_2 \sum_{UNN} (\sigma_p\sigma_q) + K_3 \sum_{SQ} (\sigma_p\sigma_q\sigma_r\sigma_s)} \quad (27)$$

annimmt.

Anders als beim eindimensionalen Ising-Modell ist hier

$$Z(N, K) \neq [f(K)]^{\frac{N}{2}} Z\left(\frac{N}{2}, K'\right),$$

da die Terme mit K_2 und K_3 zuviel sind.

Um Z dennoch zu berechnen, können verschiedene Approximationen gemacht werden (dies sind wieder die ersten Näherungen die gemacht werden, bisher war alles exakt). Im Folgenden werden 2 verschiedene Approximationen vorgestellt:

(1) Eine mögliche Näherung ist, K_2 und K_3 zu vernachlässigen und zu null zu setzen. Mit $K_2 = K_3 = 0$ und $K_1 := K'$ folgt also

$$Z(N, K) = [f(K)]^{\frac{N}{2}} Z\left(\frac{N}{2}, K'\right), \quad (28)$$

mit $f(K) = 2 \cosh^{1/2}(2K) \cosh^{1/8}(4K)$ und $K' = \frac{1}{4} \ln[\cosh(4K)]$.

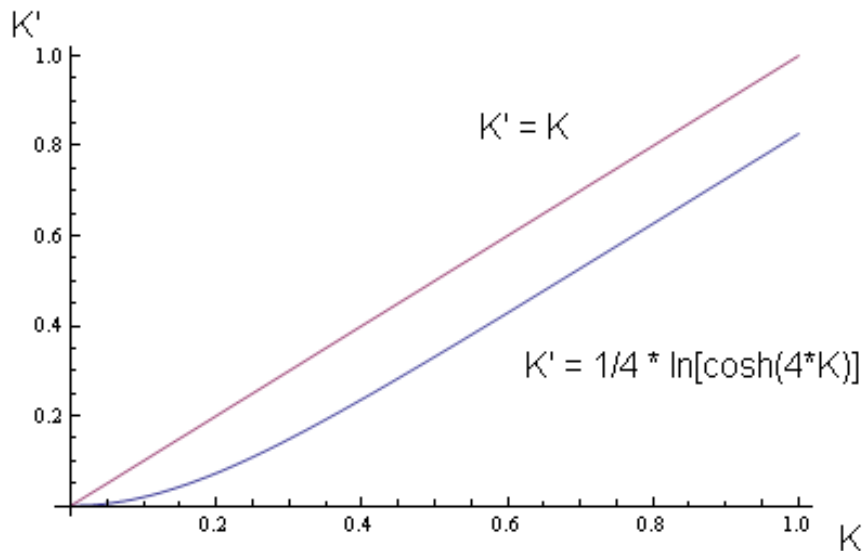


Abb. 8: $K'(K)$ aus Gleichung 22 im Vergleich mit $K'=K$

Wie in Abbildung 8 zu sehen ist, ist K' immer kleiner als K . Vergleicht man Abbildung 8 mit Abbildung 3, so erkennt man, dass es in dieser Näherung qualitativ keinen Unterschied zu dem eindimensionalen Ising-Modell gibt.

(2) Eine alternative Approximation berücksichtigt K_1 und K_2 und vernachlässigt nur K_3 . K_1 beschreibt die Kopplung zwischen Nächsten-Nachbarn, K_2 die zwischen Über-Nächsten-Nachbarn. D.h. K_1 und K_2 beschreiben im Prinzip das Gleiche nur für verschiedene Nachbarn.

Wenn auf dem Gitter mit $\frac{N}{2}$ Spins (Spins mit offenem Kreis in Abbildung 7 sind schon aus der Zustandsumme herausgerechnet), alle Spins in eine Richtung ausgerichtet sind, ist die Energie E des Systems gegeben durch

$$E = -Nk_BTK_1 - Nk_BTK_2, \quad (29)$$

da es N Nächste-Nachbarn und N Über-Nachste-Nachbarn gibt. Daher wird eine neue Kopplungskonstante K' zu

$$K' = K_1 + K_2 = \frac{3}{8} \ln[\cosh(4K)] \quad (30)$$

definiert und $K_2 = K_3 = 0$ gesetzt. Es folgt also

$$Z(N, K) = [f(K)]^{\frac{N}{2}} Z\left(\frac{N}{2}, K'\right), \quad (31)$$

mit $f(K) = 2 \cosh^{1/2}(2K) \cosh^{1/8}(4K)$ und $K' = \frac{3}{8} \ln[\cosh(4K)]$.

Der einzige Unterschied zur Approximation (1) ist der Vorfaktor von K' , der hier $\frac{3}{8}$ und vorher $\frac{1}{4}$ beträgt.

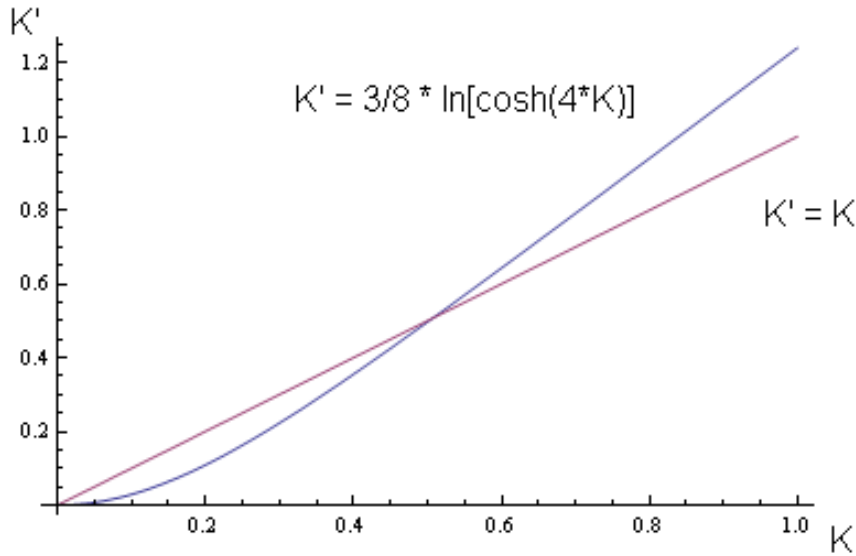


Abb. 9: $K'(K)$ aus Gleichung 30 im Vergleich mit $K'=K$

In Abbildung 9 ist $K'(K)$ im Vergleich mit $K'=K$ gezeigt. Wie man sehen kann ist $K' \leq K$ für $0 \leq K \leq 0,506981$ und $K' \geq K$ für $K \geq 0,506981$. Man erhält also einen Phasenübergang für

$$K = 0,506981 = K_C \quad (32)$$

(folgt auch wenn man die Rechnung von Gleichung 12 bis Gleichung 15 mit $f(K) = 2 \cosh^{1/2}(2K) \cosh^{1/8}(4K)$ und $K' = \frac{3}{8} \ln[\cosh(4K)]$ durchführt).

Betrachtet man das Flussdiagramm von K (siehe Abbildung 10)

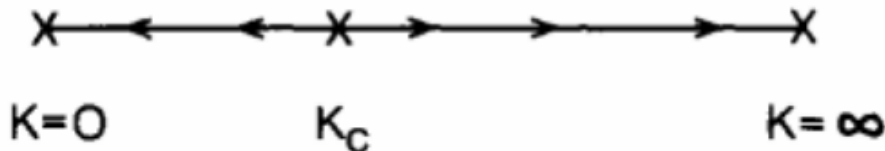


Abb. 10: Flussdiagramm von K für das 2D-Ising-Modell, Fixpunkte markiert durch \times

so sieht man, dass es 3 Fixpunkte $K=0$ (stabil), $K=\infty$ (stabil) und $K_C = 0,506981$ (instabil) gibt.

Die exakte Lösung von Onsager beträgt (vergleich Abbildung 1 und Gleichung 5)

$$\frac{T_C}{J/k_B} = 2,269 \quad (33)$$

$$K_C = \left(\frac{T_C}{J/k_B}\right)^{-1} = \frac{1}{2,269} = \frac{J}{k_B T_C} = 0,44069. \quad (34)$$

Die approximative Lösung im Zweidimensionalen enthält also einen Phasenübergang und liefert einen hinreichend genauen Wert für welches Verhältniss von J zu T dieser auftritt.

5 Quellen

Humphrey J. Maris and Leo P. Kadanoff, Teaching the renormalization group, Am. J. Phys. 46(6), June 1978

Online abrufbar unter: <http://www.scribd.com/doc/21813392/Teaching-renormalization-group-in-statistical-physics>