

Seminar zur Theorie der Teilchen und Felder - Wintersemester 2009/10

# Kadanoff-Konstruktion

Sven Musberg

Münster, 6. Januar 2010

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Skalierung</b>	<b>2</b>
2.1	Skalentransformation . . . . .	2
2.2	Hamilton-Funktionen . . . . .	3
2.3	Zustandssummen . . . . .	3
2.4	Skalierung der freien Energie . . . . .	4
2.5	Skalierung der Korrelationsfunktion . . . . .	5
2.6	Kritische Exponenten . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Zusammenhang mit der Skalierungshypothese</b>	<b>6</b>

# 1 Einleitung

Die Kadanoff-Konstruktion ist eine Skalentransformation des Ising-Modells, welche auf Überlegungen von Leo Philip Kadanoff<sup>1.1</sup> zum Phasenübergang dieses Modells zurückgeht. Sie ist ein heuristisches Argument zur Unterstützung der Skalenhypothese.

Durch bestimmte Skalentransformationen zeigen die thermodynamischen Potentiale und die Korrelationsfunktion ein bestimmtes Transformationsverhalten, welches im Folgenden ohne streng mathematische Beweisführung bestimmt wird. Dies beruht im Wesentlichen auf der Annahme, dass die Korrelationslänge  $\xi$  am kritischen Punkt für  $\varepsilon = 0$  divergiert:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \xi(\varepsilon) = \infty \tag{1.1}$$

Dabei ist  $\varepsilon = \frac{T-T_C}{T_C}$  die reduzierte Temperatur eines Systems mit der kritischen Temperatur  $T_C$ . Die Korrelationslänge ist Maß für Reichweite der Wechselwirkung. Daher sind laut Annahme nahe des kritischen Punkts für  $|\varepsilon| \ll 1$  Fluktuationen jeder räumlichen Ausdehnung vorhanden.

# 2 Skalierung

## 2.1 Skalentransformation

Gegeben sei ein System aus  $N$  Einzelspins  $S_i$  an Orten  $\vec{x}_i = \vec{X}_i a_0$ . Dabei sei  $\vec{X}_i = (n_1^{(i)}, \dots, n_d^{(i)})$  ein  $d$ -dimensionales Gitter mit der Gitterkonstanten  $a_0$ . In Abhängigkeit der Korrelationslänge und der Gitterkonstanten werde nun ein Skalentransformationsfaktors  $L$  gewählt, für den gelte:

$$1 \ll L \ll \frac{\xi}{a_0} \tag{2.1}$$

Die Einzelspins  $S_i$  werden damit in  $n = N/L^d$  Spinblöcke  $S'_\alpha = \sum_{i \in \alpha} S_i$  aufgeteilt, welche die Kantenlängen  $La_0$  und die Mittelpunkte  $\vec{x}'_\alpha = \vec{X}'_\alpha La_0$  haben:

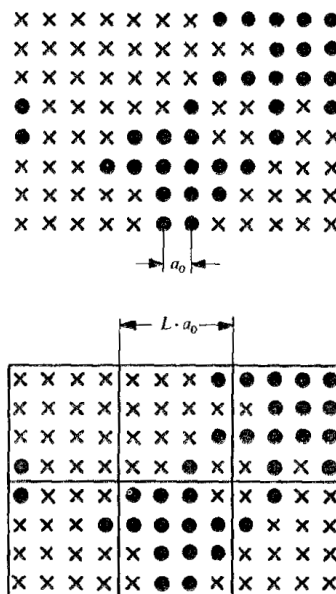


Abbildung 1: Zur Skalentransformation im Spin-System

<sup>1.1</sup>geb. am 14.1.1937, US-Amerikanischer theoretischer Physiker und angewandter Mathematiker

## 2.2 Hamilton-Funktionen

Die Hamilton-Funktion  $\mathcal{H}$  des Einzelspin-Systems ist die Hamilton-Funktion des Ising-Modells. Dabei besitzt jeder Gitterpunkt ein permanentes magnetisches Moment  $\mu_i = \mu S_i$ . Es wird angenommen, dass die klassischen Spinvariablen nur zwei Einstellmöglichkeiten  $S_i = \pm 1$  haben.

Die Wechselwirkung der Spins untereinander sei isotrop mit einer Kopplungsstärke  $J$  und finde nur zwischen nächsten Nachbarn statt. Weiterhin liege eine Wechselwirkung der Spins mit einem äußeren Magnetfeld  $B$  vor. Mit der Wechselwirkungskonstanten  $b \equiv \mu B$  gilt dann:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - b \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.2)$$

Nahe des kritischen Punkts mit  $|\varepsilon| \ll 1$  divergiert die Korrelationslänge. Da dann Fluktuationen jeder räumlichen Ausdehnung existieren, haben die Einzelspins innerhalb eines Blocks für eine Skalentransformation  $L$  mit  $1 \ll L \ll \xi/a_0$  eine Vorzugsrichtung. Die Wechselwirkungen der Spinblöcke erfolgt somit ähnlich wie die Wechselwirkungen der Einzelspins. Die Freiheitsgrade innerhalb eines Blocks werden vollständig vernachlässigt.

Dies lässt sich durch eine Computersimulation nach Abbildung 2 veranschaulichen. In der Nähe des kritischen Punkts ist die Bildung von Gebieten mit gleicher Ausrichtung der Spins zu erkennen.

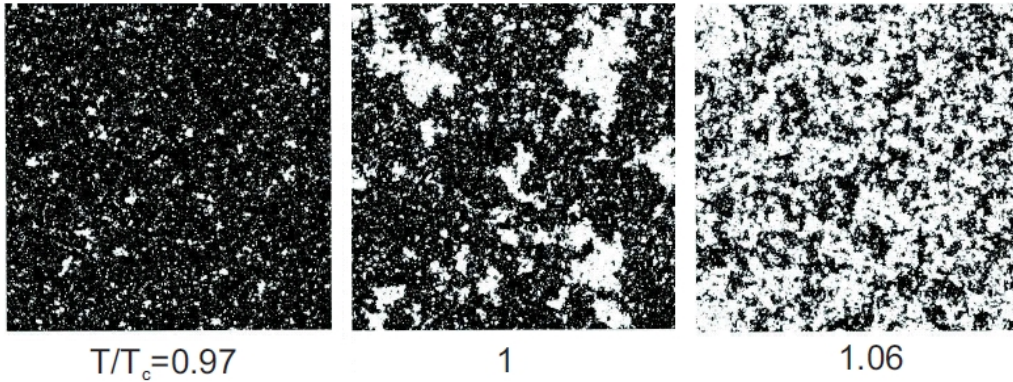


Abbildung 2: Typische Spinkonfigurationen eines 2-dimensionalen Ising-Modells bei verschiedenen Temperaturen nahe des kritischen Punkts mit  $b = 0$

Es kann also angenommen werden, dass die Blockspins wie die Einzelspins nur zwei Einstellmöglichkeiten  $S'_\alpha = \pm 1$  haben. Die Hamilton-Funktion dieses Systems hat daher dieselbe Struktur. Mit der Kopplungsstärke  $J'$  zwischen den Spinblöcken und der Wechselwirkungskonstanten  $b'$  gilt:

$$\mathcal{H}' = -J' \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} S'_\alpha S'_\beta - b' \sum_{\alpha=1}^n S'_\alpha \quad (2.3)$$

## 2.3 Zustandssummen

Die exakte Zustandssumme ist weder für  $\mathcal{H}$  noch für  $\mathcal{H}'$  bekannt. Jedoch sind die langreichweitigen Korrelationen, die für das singuläre Verhalten am kritischen Punkt verantwortlich sind, in beiden Bildern erfasst. Da die Hamilton-Funktionen (2.2) und (2.3) dieselbe Struktur haben, sollten die Zustandssummen, die sich aus diesen ergeben, dasselbe singuläre Verhalten zeigen. Die unterschiedlichen Faktoren  $J'$  und  $b'$  lassen jedoch einen anderen kritischen Bereich  $\varepsilon'$  im Blockspin-Bild erwarten.

Die Zustandssummen sind insofern äquivalent, als dass daraus dasselbe singuläre Verhalten für

$\varepsilon = 0$  und  $b = 0$  und damit der Phasenübergang des Systems folgt:

$$\mathcal{Z}(\varepsilon, b; N) = \sum_{\{S_i\}} \exp\left(-\frac{1}{kT}\mathcal{H}\right) \quad (2.4)$$

$\Leftrightarrow$

$$\mathcal{Z}'(\varepsilon, b; n) = \sum_{\{S'_\alpha\}} \exp\left(-\frac{1}{kT}\mathcal{H}'\right) \quad (2.5)$$

## 2.4 Skalierung der freien Energie

Die freie Energie  $F$  ergibt sich nach  $F = -kT \ln \mathcal{Z}$  direkt aus der Zustandssumme. Aus der Äquivalenz der Zustandssummen  $\mathcal{Z}(\varepsilon, b; N)$  des Einzelspin-Systems und  $\mathcal{Z}'(\varepsilon, b; n)$  des Blockspin-Systems folgt daher, dass die freie Energie  $F(\varepsilon, b; N)$  bis auf einen am kritischen Punkt regulär bleibenden Anteil äquivalent zur freien Energie  $F'(\varepsilon, b; n)$  ist.

Für die folgenden Überlegungen werden die Zustandssumme und die freie Energie pro Einzelspin beziehungsweise pro Blockspin definiert:

$$z(\varepsilon, b) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt[N]{\mathcal{Z}(\varepsilon, b; N)} \quad z'(\varepsilon, b) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{\mathcal{Z}'(\varepsilon, b; n)} \quad (2.6)$$

$$f(\varepsilon, b) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} F(\varepsilon, b; N) \quad f'(\varepsilon, b) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} F'(\varepsilon, b; n) \quad (2.7)$$

Nahe dem kritischen Punkt für  $|\varepsilon|, |b| \ll 1$  gelten für diese Größen:

$$F(\varepsilon, b; N) = Nf(\varepsilon, b) \quad (2.8)$$

$\Leftrightarrow$

$$F'(\varepsilon, b; n) = nf(\varepsilon, b) \quad (2.9)$$

Daraus folgt mit  $n = N/L^d$ :

$$f(\varepsilon, b) \Leftrightarrow \frac{n}{N} f'(\varepsilon, b) = \frac{1}{L^d} f'(\varepsilon, b) \quad (2.10)$$

Die Zustandssumme (2.2) des Einzelspin-Systems hat in den Variablen  $(J, b)$  dieselbe Struktur wie die Zustandssumme (2.3) des Blockspin-Systems in  $(J', b')$ . Daher hat  $z'$  in den Variablen  $(\varepsilon', b')$  die gleiche Struktur wie  $z$  in  $(\varepsilon, b)$ :

$$z'(\varepsilon, b) = z(\varepsilon', b') \quad (2.11)$$

Daraus folgt  $f'(\varepsilon, b) = f(\varepsilon', b')$  und damit:

$$f(\varepsilon, b) = \frac{1}{L^d} f'(\varepsilon, b) = \frac{1}{L^d} f(\varepsilon', b') \quad (2.12)$$

Um das Verhalten der freien Energie unter Skalentransformationen zu erhalten, muss nun die Beziehung zwischen den Parametern  $(\varepsilon, b)$  und  $(\varepsilon', b')$  bekannt sein. Es kann vorausgesetzt werden, dass der kritische Punkt derselbe ist, da sich an der Eigenschaft des Phasenübergangs unter Skalentransformationen nichts ändert:

$$(\varepsilon = 0, b = 0) \Leftrightarrow (\varepsilon' = 0, b' = 0) \quad (2.13)$$

Die Konstante  $b'$  des Feldanteils muss aufgrund der Linearität der Hamilton-Funktion im Feld  $B$  auch linear in  $B$  sein. Für die reduzierte Temperatur wird ein analoger Ansatz gemacht:

$$b' = D(L)b \quad (2.14)$$

$$\varepsilon' = E(L)\varepsilon \quad (2.15)$$

Dabei sind  $D(L)$  und  $E(L)$  von  $b$  beziehungsweise  $\varepsilon$  unabhängige Größen, die im Allgemeinen Funktionen von  $L$  sind. Mit diesen Ansätzen gilt nach Gleichung (2.12):

$$L^d f(\varepsilon, b) = f(E(L)\varepsilon, D(L)b) \quad (2.16)$$

Seien  $L_1$  und  $L_2$  zwei Skalentransformationen. Dann muss die Komposition wieder eine Skalentransformation mit  $L' = L_1 L_2 \ll \xi/a_0$  sein:

$$\begin{aligned} (L_1 L_2)^d f(\varepsilon, b) &= f(E(L_1 L_2)\varepsilon, D(L_1 L_2)b) \\ &= L_1^d L_2^d f(\varepsilon, b) = f(E(L_1)E(L_2)\varepsilon, D(L_1)D(L_2)b) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Daraus folgen die Funktionalgleichungen für  $E(L)$  und  $D(L)$ :

$$D(L_1 L_2) = D(L_1)D(L_2) \quad (2.18)$$

$$E(L_1 L_2) = E(L_1)E(L_2) \quad (2.19)$$

Stetige Lösungen der Funktionalgleichungen sind nur gegeben für  $x, y > 0$  durch  $D(L) = L^x$  und  $E(L) = L^y$ . Dann gelten folgende Skalentransformationen für die Parameter  $b$  und  $\varepsilon$ :

$$b' = L^x b \quad (2.20)$$

$$\varepsilon' = L^y \varepsilon \quad (2.21)$$

Damit ergibt sich die Funktionalgleichung für die freie Energie pro Einzelspin:

$$f(L^y \varepsilon, L^x b) = L^d f(\varepsilon, b) \quad (2.22)$$

## 2.5 Skalierung der Korrelationsfunktion

Die Korrelationsfunktion  $\Gamma_{ij}$  zweier Einzelspins  $S_i$  und  $S_j$  ist ein Maß für die Korrelation der beiden Spins. Um das Verhalten dieser Funktion unter Skalentransformationen zu untersuchen wird die Einstellungsenergie des Einzelspin-Systems und des Blockspin-Systems im äußeren Magnetfeld betrachtet. Diese muss in beiden Systemen gleich sein:

$$b \sum_{i=1}^N S_i = b' \sum_{\alpha=1}^n S_\alpha \quad (2.23)$$

Mit  $n = N/L^d$  und  $b' = L^x b$  folgt daraus:

$$\langle S' \rangle = \frac{1}{n} \sum_{\alpha=1}^n S'_\alpha = \frac{N}{n} \frac{b}{b'} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \right) = L^{d-x} \langle S \rangle \quad (2.24)$$

Damit ist die Korrelationsfunktion  $\Gamma'_{\alpha\beta}$  zweier Spinblöcke  $S'_\alpha$  und  $S'_\beta$  abhängig von der Korrelationsfunktion  $\Gamma_{ij}$  zweier Einzelspins  $S_i$  und  $S_j$  mit  $i \in \alpha$  und  $j \in \beta$ :

$$\begin{aligned} \Gamma'_{\alpha\beta} &= \langle S'_\alpha S'_\beta \rangle - \langle S'_\alpha \rangle \langle S'_\beta \rangle \\ &= L^{2(d-x)} (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) = L^{2(d-x)} \Gamma_{ij} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Im Folgenden wird angenommen, dass  $\Gamma'_{\alpha\beta}$  in den Variablen  $(\varepsilon', b', R'_{\alpha\beta} = |\vec{X}'_\alpha - \vec{X}'_\beta|)$  dieselbe funktionale Form wie  $\Gamma_{ij}$  in  $(\varepsilon, b, R_{ij} = |\vec{X}_i - \vec{X}_j|)$  hat:

$$\begin{aligned} \Gamma(R_{ij}; \varepsilon, b) &= L^{-2(d-x)} \Gamma(R'_{\alpha\beta}; \varepsilon', b') \\ &= L^{-2(d-x)} \Gamma(R_{ij}/L; L^y \varepsilon, L^y b) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Damit ergibt sich die Funktionalgleichung für die Korrelationsfunktion:

$$\Gamma(R_{ij}/L; L^y \varepsilon, L^y b) = L^{2(d-x)} \Gamma(R_{ij}; \varepsilon, b) \quad (2.27)$$

## 2.6 Kritische Exponenten

### 2.6.1 Kritischer Exponent $\eta$

Sei speziell  $\lambda = R_{ij}^{2(d-x)}$ . Dann gilt am kritischen Punkt für  $\varepsilon = 0$ :

$$\Gamma(1, 0) = R_{ij}^{2(d-x)} \Gamma(R_{ij}, 0) \quad (2.28)$$

Andererseits ist das Verhalten der Korrelationsfunktion am kritischen Punkt durch den kritischen Exponenten  $\eta$  bestimmt:

$$\Gamma(R_{ij}, \varepsilon) \sim \frac{\exp(-R_{ij}/\xi(\varepsilon))}{R_{ij}^{d-2+\eta}} \quad (2.29)$$

Für  $\varepsilon \rightarrow 0$  mit  $\xi(\varepsilon) \rightarrow \infty$  gilt:

$$\Gamma(R_{ij}, 0) \sim \frac{1}{R_{ij}^{d-2+\eta}} \quad (2.30)$$

Daraus folgt ein Zusammenhang zwischen der bislang unbestimmten Größe  $x$  und dem kritischen Exponenten  $\eta$ :

$$2(d-x) = d-2+\eta \quad (2.31)$$

### 2.6.2 Kritische Exponenten $\nu$ und $\nu'$

Sei speziell  $\lambda = (\pm\varepsilon)^{-2(d-x)/y}$ . Dann gilt:

$$\Gamma((\pm\varepsilon)^{1/y} R_{ij}, \pm 1) = (\pm\varepsilon)^{-2(d-x)/y} \Gamma(R_{ij}, \varepsilon) \quad (2.32)$$

Daraus folgt:

$$\frac{\exp(-(\pm\varepsilon)^{1/y} R_{ij}/\xi(\pm 1))}{(\pm\varepsilon)^{(d-2+\eta)/y} R_{ij}^{d-2+\eta}} \sim (\pm\varepsilon)^{-2(d-x)/y} \frac{\exp(-R_{ij}/\xi(\varepsilon))}{R_{ij}^{d-2+\eta}} \quad (2.33)$$

Da  $2(d-x) = d-2+\eta$  gilt, kann dies nur gelten, falls sich die Korrelationslänge am kritischen Punkt folgendermaßen verhält:

$$\xi(\varepsilon) \sim (\pm\varepsilon)^{1/y} \xi(\pm 1) \quad (2.34)$$

Andererseits ist das Verhalten der Korrelationslänge am kritischen Punkt durch die kritischen Exponenten  $\nu$  und  $\nu'$  bestimmt:

$$\xi(\varepsilon) \sim (\pm\varepsilon)^{\nu'} \quad (2.35)$$

Daraus folgt ein Zusammenhang zwischen der Größe  $y$  und den kritischen Exponenten  $\nu, \nu'$ :

$$\nu = \nu' = \frac{1}{y} \quad (2.36)$$

## 3 Zusammenhang mit der Skalierungshypothese

Sei  $\lambda \equiv L^d$  beziehungsweise  $L = \lambda^{\frac{1}{d}}$  mit  $1 \ll \lambda \ll (\xi/a_0)^d$ . Dann ist die freie Energie  $f$  mit  $a_\varepsilon = \frac{y}{d}$  und  $a_b = \frac{x}{d}$  nach Gleichung (2.22) eine verallgemeinerte homogene Funktion:

$$f(\lambda^{a_\varepsilon} \varepsilon, \lambda^{a_b} b) = \lambda f(\varepsilon, b) \quad (3.1)$$

Ohne äußeres Magnetfeld mit  $b = 0$  sei  $\Gamma(R_{ij}, \varepsilon) \equiv \Gamma(R_{ij}; \varepsilon, b = 0)$ . Sei dann  $\lambda \equiv L^{2(d-x)}$  beziehungsweise  $L = \lambda^{1/2(d-x)}$  mit  $1 \ll \lambda \ll (\xi/a_0)^{2(d-x)}$ . Dann ist die Korrelationsfunktion  $\Gamma$  mit  $\alpha_R = -\frac{1}{2(d-x)}$  und  $\alpha_\varepsilon = \frac{y}{2(d-x)}$  nach Gleichung (2.27) eine verallgemeinerte homogene Funktion:

$$\Gamma(\lambda^{\alpha_R} R_{ij}, \lambda^{\alpha_\varepsilon} \varepsilon) = \lambda \Gamma(R_{ij}, \varepsilon) \quad (3.2)$$

Diese Ergebnisse, die mit heuristischen Methoden gewonnen wurden, entsprechen der Skalierungshypothese. Nach dieser sind die thermodynamischen Potentiale verallgemeinerte homogene Funktionen. Dies drückt die Skaleninvarianz des Systems aus und zeigt die thermodynamische Äquivalenz des Einzelspin-Systems und des Blockspin-Systems in der Nähe des kritischen Punkts. Die Details der Wechselwirkung haben nach diesen Überlegungen keinen Einfluss auf das Verhalten des Systems in diesem Bereich.

## Literatur

- [1] <http://jfi.uchicago.edu/~leop/>
- [2] [http://physics.uchicago.edu/research/areas/condensed\\_t.html](http://physics.uchicago.edu/research/areas/condensed_t.html)
- [3] W. DIETERICH: *Auszüge aus der Vorlesung „Theorie der Phasenübergänge“* SS1995.
- [4] W. WEIDLICH: *Thermodynamik und statistische Mechanik*, Akademische Verlagsgesellschaft, Wiesbaden, 1976
- [5] H. E. STANLEY: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford, 1971
- [6] W. NOLTING: *Grundkurs Theoretische Physik 6 - Statistische Physik* 6. Auflage.
- [7] [http://www.q2cfestival.com/play.php?lecture\\_id=7976](http://www.q2cfestival.com/play.php?lecture_id=7976)