Seminar zur Theorie der Teilchen und Felder

Skalenhypothese

Michael Topp

06.01.2010

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Die Skalenhypothese erlaubt es, mit einfachen Mitteln und auf Ebene der Thermodynamik Aussagen über Zusammenhänge zwischen kritischen Exponenten zu gewinnen. Diese Aussagen sind ihrerseits dann präziser als die bekannten Ungleichungen (Widom usw.), die man bereits ohne das so genannte Homogenitätspostulat (dies ist im Prinzip die Skalenhypothese) erhalten hat. Allerdings gewinnt man im Gegensatz zu anderen klassischen Theorien (Landau) keine konkreten Werte für einzelne Exponenten aus der Skalenhypothese. Dies liegt daran, dass man, wie sich im Folgenden zeigen wird, mit viel schwächeren Annahmen auskommt.

2 Homogene Funktionen

Um die Skalenhypothese formulieren zu können, wird der Begriff der homogenen Funktion benötigt. Zunächst geht es dabei um eine Funktion einer Variablen. Dies kann dann auf n Variablen erweitert werden und schließlich die allgemeinste Form in den „generalisierten homogenen Funktionen“ finden. Für den Fall $n = 2$ bilden diese schließlich die Grundlage für die weitere Diskussion.

2.1 Funktionen von einer Variablen

Definition:

$$f(\lambda r) = g(\lambda)\, f(r) \qquad \forall \lambda \in \mathbb{R} \tag{1}$$

Daran liest man folgende Eigenschaft von homohenen Funktionen ab. Ist $f(r)$ bei $r = r_0$ und $g(\lambda)$ bekannt, so ist $f(r)$ auf dem gesamten Definitions-Bereich bekannt, da $f(\lambda r_0) = g(\lambda)\, f(r_0)$.

Man kann sich zur Veranschaulichung an dieser Stelle auch ein Fraktal vorstellen. Dann besteht zwischen dem Fraktal und einer homogenen Funktion eine gewisse Analogie. Das $f(r_0)$ beschreibt das Fraktal an einer Stelle und das $g(\lambda)$ seiner Konstruktionsvorschrift. Somit ist im Prinzip das gesamte Fraktal mit seiner immer wiederkerenden Struktur bekannt. Durch Wahl eines λ kann man nun das Fraktal auf verschiedenen Skalen betrachten (quasi hinein- und herauszoomen) und stellt fest, dass das, was man dann sieht, auf allen Skalen gleich aussieht.

2.2 Funktionen von n Variablen

Definition:

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, ..., \lambda x_n) = g(\lambda)\, f(x_1, x_2, ..., x_n) \qquad \forall \lambda \in \mathbb{R} \tag{2}$$

oder mit $\vec{r} = (x_1, x_2, ..., x_n)$ $\qquad f(\lambda \vec{r}) = g(\lambda)\, f(\vec{r})$.

Für beide Fälle lässt sich der folgende Satz leicht beweisen.

Satz: Wenn $g(\lambda)$ diffb. $\Rightarrow g(\lambda) = \lambda^p$. p heißt dann Grad der Homogenität.

Beweis: Anwendung zweier Skalentrafos hintereinander

$$\begin{aligned} f(\lambda[\mu r]) = g(\lambda)\, f(\mu r) &= g(\lambda)\, g(\mu)\, f(r) \\ \text{und } f([\lambda\mu]\, r) &= g(\lambda\mu)\, f(r) \\ \Rightarrow g(\lambda\mu) &= g(\lambda)\, g(\mu) \quad (*) \end{aligned}$$

Der Fall $g = 0$ erfüllt zwar $(*)$, ist aber nicht von (phys.) Interesse.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial(*)}{\partial\mu}: \quad \frac{\partial}{\partial\mu} g(\lambda\mu) = \lambda g'(\lambda\mu) &= g(\lambda)\, g'(\mu) \quad (**) \\
\text{Wähle } \mu = 1 \text{ und setze } g'(\mu = 1) &= p \\
(**) \Rightarrow \frac{g'(\lambda)}{g(\lambda)} &= \frac{d}{d\lambda} \ln g(\lambda) = \frac{p}{\lambda} \\
\Rightarrow \ln g(\lambda) &= p \ln \lambda + c \\
\Rightarrow g(\lambda) &= e^c \cdot \lambda^p \\
\Rightarrow g'(\lambda) = p \cdot e^c \cdot \lambda^{p-1}; \quad \text{wegen } g'(1) &= p \Rightarrow c = 0 \\
\Rightarrow g(\lambda) &= \lambda^p
\end{aligned}
$$

2.3 Generalisierte homogene Funktionen

Wie bereits vorhin vermerkt, ist hier nur der Fall mit $n = 2$ Variablen von Interesse, so dass die generalisierten homogenen Funktionen hier nur für die Variablen x und y definiert werden. Eine Übertragung auf beliebig viele Variablen ist trivial möglich.

Definition:

$$f\left(\lambda^a x, \lambda^b y\right) = \lambda f(x, y) \qquad a, b \in \mathbb{R},\ \forall \lambda \in \mathbb{R} \tag{3}$$

Es gibt hier keine weitere Verallgemeinerung etwa durch $\lambda^p f(x, y)$ auf der rechten Seite von (3), da durch Wahl von $\lambda = \lambda^{1/p}$ dies auf den Fall mit $p = 1$ bei der Annahme, rechts stünde $\lambda^p f(x, y)$ führt und dies die Form der eingeführten Definition so wieder erlangt.

3 Skalenhypothese

Die Skalenhypothese besagt nun, dass die thermodynamischen Potentiale zumindest in der Nähe des kritischen Punktes die Form einer generalisierten homogenen Funktion annehmen. Im Folgenden werden hier konkret ausgehend von der Gibbs'schen freien Entahlpie G in Abhängigkeit der Variablen H und $\epsilon = \frac{T - T_C}{T_C}$, wobei T_C die kritische Temperatur bezeichnet und ϵ reduzierte Temperatur genannt wird, die in der Einleitung angekündigten Relationen zwischen kritischen Exponenten (so genannte Skalengesetze) hergeleitet.

3.1 Homogenitätspostulat

Konkret lautet die erwähnte Forderung an G also

$$G\left(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_H} H\right) = \lambda G(\epsilon, H), \tag{4}$$

was als Homogenitätspostulat bezeichnet wird. Wie der Name „Hypothese“ oder „Postulat“ schon besagt, handelt es sich bei (4) um eine nicht beweisbare Aussage. Dass diese aber dennoch eine Rechtfertigung hat, sieht man z.B. an Hand der Kadanoff-Kontruktion, die die Skalenhypothese plausibel macht. Eine weiteres Ergebnis, dass das gesamte Konzept der Skalierung plausibel erscheinen lässt, liefert die Skalierung von Magnetfeld und Magnetisierung. Entsprechende Messungen zeigen hier ein universelles Verhalten, wie es die Ergebnisse der Skalenhypothese auch fordern (universelle Gesetze für kritische Exponenten). Dies wird den Abschluss der Ausführungen hier bilden.

3.2 Skalengesetze

Zunächst wird die erste Ableitung von (4) nach dem Magnetfeld gebildet. Daraus ergeben sich nach einer Limesbildung und durch geschickte Wahl der Skalenparameter λ zwei Gleichungen für die beiden Exponenten a_ϵ und a_H, die dann mit zwei kritischen Exponenten verknüpft sind. Danach bildet man jeweils die zweifache Ableitung von (4) nach dem Magnetfeld bzw. nach der (reduzierten) Temperatur und verfährt ähnlich wie bei der ersten Ableitung. Dadurch gewinnt man schließlich die angesprochenen Skalengesetze. Bei dieser Herangehensweise ist jeweils nur noch der Vergleich mit der Definition der jeweiligen kritischen Exponenten von Nöten sowie die Verwendung einiger simpler thermodynamischer Gleichungen.

$$\frac{\partial G}{\partial H}: \qquad \lambda^{a_H} \frac{\partial \left[G\left(\lambda^{a_\epsilon}\epsilon, \lambda^{a_H} H\right)\right]}{\partial \left[\lambda^{a_H} H\right]} = \lambda \frac{\partial G\left(\epsilon, H\right)}{\partial H} \tag{5}$$

Da $\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right) = -M$ gilt, wird aus (5)

$$\lambda^{a_H - 1} M\left(\lambda^{a_\epsilon}\epsilon, \lambda^{a_H} H\right) = M\left(\epsilon, H\right). \tag{6}$$

Hier werden nun zwei Fälle betrachtet:

- 1. man setzt $H = 0$ und bildet $\epsilon \to 0$ und findet per Definition einen Zusammenhang mit dem kritischen Exponenten β und
- 2. man setzt $\epsilon = 0$ und bildet $H \to 0$ und findet per Definition einen Zusammenhang mit dem kritischen Exponenten δ.

Zu 1.: Einsetzen von $H = 0$ und $\lambda = (-1/\epsilon)^{1/a_\epsilon}$ in (6) liefert

$$M\left(\epsilon, 0\right) = \left(-\epsilon\right)^{(1-a_H/a_\epsilon)} M(-1, 0). \tag{7}$$

M(-1,0) ist einfach ein Skalar und für $\epsilon \to 0^-$ erfüllt also (7) die Definition

$$M\left(\epsilon, 0\right) \sim \left(-\epsilon\right)^{\beta}, \tag{8}$$

wobei $\sim$ „verhält sich im krit. Bereich wie“ bedeutet. Durch Vergleich der Exponenten erhält man

$$\beta = \frac{1 - a_H}{a_\epsilon}. \tag{9}$$

Zu 2.: Einsetzen von $\epsilon = 0$ und $\lambda = H^{1/a_H}$ in (6) liefert

$$M\left(0, H\right) = H^{(1-a_H/a_H)} M(0, 1). \tag{10}$$

Analoge Argumentation zu Fall 1 aber mit $H \to 0$ erfüllt dann

$$M\left(0, H\right) \sim H^{1/\delta}, \tag{11}$$

wobei man hier durch Vergleich abliest:

$$\delta = \frac{a_H}{1 - a_H}. \tag{12}$$

Das Gleichungssystem aus (9) und (12) lässt sich nun auflösen zu

$$a_\epsilon = \frac{1}{\beta}\frac{1}{\delta + 1}, \tag{13}$$

$$a_H = \delta \frac{1}{\delta + 1}. \tag{14}$$

Dies erlaubt bei Kenntnis der kritischen Exponenten β und δ immerhin eine Aussage darüber, wie G in der Nähe des kritischen Punktes aussieht.

Da man aus der zweiten Ableitung von G nach dem Magnetfeld die Suszeptibilität gewinnt, erhält man

$$\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}: \qquad \lambda^{2a_H} \chi_T \left(\lambda^{a_\epsilon}\epsilon, \lambda^{a_H} H\right) = \lambda \chi_T \left(\epsilon, H\right). \tag{15}$$

Wählt man $H = 0$ und setzt $\lambda = (-\epsilon)^{-1/a_\epsilon}$, wird aus (15)

$$\chi_T \left(\epsilon, 0\right) = (-\epsilon)^{-(2a_H - 1)/a_\epsilon} \chi_T(-1, 0). \tag{16}$$

Für $\epsilon \to 0^-$ findet man durch Vergleich wegen $\chi_T \left(\epsilon, 0\right) \sim (-\epsilon)^{-\gamma'}$

$$\gamma' = \frac{2a_H - 1}{a_\epsilon}. \tag{17}$$

Würde man statt $\lambda = (-\epsilon)^{-1/a_\epsilon}$ nämlich $\lambda = \epsilon^{-1/a_\epsilon}$ in (15) einsetzen und dann $\epsilon \to 0^+$ betrachten, so würde man durch Vergleich mit $\chi_T \left(\epsilon, 0\right) \sim \epsilon^{-\gamma}$ dann auch für γ den Ausdruck für γ' erhalten, so dass also

$$\gamma' = \gamma = \frac{2a_H - 1}{a_\epsilon} \tag{18}$$

gilt. Einsetzen von (13) und (14) in (17) liefert die Windom-Ungleichung nun in Form einer Gleichung:

$$\gamma' = \beta \left(\delta - 1\right). \tag{19}$$

Durch Bilden der zweiten Temperaturableitung des Homogenitätspostulates gelangt man nun zu zwei weiteren Gleichungen. Unter Berücksichtigung der Definition der Wärmekapazität findet man

$$\frac{\partial^2 G}{\partial \epsilon^2}: \qquad \lambda^{2a_\epsilon} C_H \left(\lambda^{a_\epsilon}\epsilon, \lambda^{a_H} H\right) = \lambda C_H \left(\epsilon, H\right). \tag{20}$$

Hier betrachtet man nun $H = 0$, wählt wieder $\lambda = (-\epsilon)^{-1/a_\epsilon}$ und erhält für $\epsilon \to 0^-$ durch Vergleich mit der Definition des kritischen Exponenten für die Wärmekapazität

$$\alpha' = 2 - \frac{1}{a_\epsilon}. \tag{21}$$

Analog zum Fall für γ' hätte man hier wieder $\lambda = \epsilon^{-1/a_\epsilon}$ setzen und $\epsilon \to 0^+$ betrachten können und würde so

$$\alpha = \alpha' = 2 - \frac{1}{a_\epsilon} \tag{22}$$

finden. Einsetzen von (13) in (21) liefert schließlich die Griffiths-Ungleichung als Gleichung:

$$\alpha' + \beta \left(\delta + 1\right) = 2. \tag{23}$$

Umstellen von (19) und Einsetzen in (23) ergibt die Rushbrooke-Ungleichung als Gleichung:

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' = 2. \tag{24}$$

Neben diesen Skalengesetzen lassen sich natürlich noch weitere Gesetze mit anderen kritischen Exponenten (z.B. η, η', ξ) herleiten, was hier aber nicht mehr gezeigt wird.

3.3 Skalierte Magnetisierung und skaliertes Magnetfeld

Den Ausgangspunkt bildet hier (6), wobei nun $\lambda = |\epsilon|^{-1/a_\epsilon}$ gewählt wird. Eingesetzt in (6) folgt so

$$M(\epsilon, H) = |\epsilon|^{(1-a_H)/a_\epsilon} M\left(\epsilon/|\epsilon|, H/|\epsilon|^{a_H/a_\epsilon}\right). \tag{25}$$

Aus (13) und (14) erhält man $a_H/a_\epsilon = \beta\delta = \beta + \gamma'$ und mit (9) lässt sich (25) umschreiben zu

$$\frac{M(\epsilon, H)}{|\epsilon|^\beta} = M\left(\frac{\epsilon}{|\epsilon|}, \frac{H}{|\epsilon|^{\beta\delta}}\right). \tag{26}$$

Man führt nun zwei Definitionen ein

- $m := |\epsilon|^{-\beta} M(\epsilon, H)$ als „skalierte Magnetisierung“ und
- $h := |\epsilon|^{-\beta\delta} H(\epsilon, M)$ als „skaliertes Magnetfeld“.

Da die rechte Seite von (26) nur von h und dem Vorzeilen von $T - T_C$ (wegen $\epsilon/|\epsilon| = \pm 1$) abhängt, kann man für die Fälle beider Vorzeichen zusammenfassend

$$F_\pm(h) = M(\pm 1, h) \tag{27}$$

schreiben, bzw. dann auch (und mit f als Inversem zu F)

$$m = F_\pm(h), \tag{28}$$

$$h = f_\pm(m). \tag{29}$$

Die Temperatur spielt hier also nur noch eine Rolle, ob der mit + oder mit − indizierte Zusammenhang gilt, nachdem man das Magnetfeld und die Magnetisierung wie hier geschehen skaliert hat. Demnach sollten Plots von m gegen h für verschiedene Isothermen so aussehen, dass man nur noch zwei Graphen (je einen für jedes Vorzeichen) erhält, die Isothermen (für gleiches Vorzeichen) also zusammen auf einer Kurve liegen und man so einen universellen Zusammenhang erhält.

So wurde von Ho und Lister 1969 $M = M(H)$ für $CrBr_3$ entlang 30 Isothermen gemessen, auf m und h umgerechnet und entsprechend geplottet. Für Ni wurde dies von anderen ebenfalls vermessen, wobei dort aber m^2 gegen h/m geplottet wurde. In beiden Fällen lagen die Messwerte schließlich in guter Näherung jeweils auf zwei Graphen (wegen des Vorzeichens), was die Annahme der Universalität bestätigt. Für $CrBr_3$ konnte man für kleine m einen linearen Bereich im Plot ausmachen, für Ni ein lineares Verhalten für h/m in m^2, ebenfalls für kleine m. Daher macht man als Ansatz einen Potenzreichenansatz für h mit nur ungeraden Exponenten gemäß

$$h = f_\pm(m) = b_1 m + b_3 m^3 + b_5 m^5 + ... \tag{30}$$

Mit den Definitionen von m und h sowie $\beta\delta = \beta + \gamma$ folgt

$$H = b_1 M|\epsilon|^\gamma + b_3 M^3 |\epsilon|^{\gamma - 2\beta} + b_5 M^5 |\epsilon|^{\gamma - 4\beta}, \tag{31}$$

woraus sich mit den Messergebnissen β und γ oder wegen $\beta\delta = \beta + \gamma$ auch β und δ, aber jeweils nur zwei kritische Exponenten, bestimmen lassen.

Dies ist auch der Grund, warum diese Ergebnisse nicht etwa einen Beweis der Skalenhypothese leisten können, da die hier vorgestellten Skalengesetze (abgesehen von $\alpha = \alpha'$ und $\gamma = \gamma'$) stets Gleichungen mit drei kritischen Exponenten darstellen. Zur Überprüfung müsste aus dem Experiment unabhängig von $\beta\delta = \beta + \gamma$ ein noch fehlender dritter kritischer Exponent bestimmt werden. Allerdings rechtfertig der experimentelle Befund, dass für skalierte Größen m und h ein universelles Verhalten gefunden wurde, die Plausibilität des Homogenitätspostulats.

4 Literatur

- W. Nolting - Grundkurs Theoretische Physik 4, 6. Auflage, Springer, 2007
- W. Nolting - Grundkurs Theoretische Physik 6, 6. Auflage, Springer, 2007
- M. E. Fisher - Scaling, Universality and Renormalization Group Theory, Lecture Notes (held during Jan. 1982 at University of Stellenbosch, South Africa)
- H. E. Stanley - Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, 1. Auflage, Oxford University Press, 1987