

Zusammenfassung zum Vortrag: Die Kadanoff-Blockspin-Idee

Walter Tewes

12.01.2013

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen	2
1.1 Das Ising-Modell	2
1.2 Kritisches Verhalten bei Ferromagneten	2
1.3 Skalierungsverhalten am kritischen Punkt	3
2 Die Kadanoff-Blockspin-Idee	5
2.1 Das heuristische Argument	5
2.2 Anwendungen	6
2.2.1 Das Gibbssche Potential	6
2.2.2 Die Korrelationsfunktion	7
2.2.3 Folgerungen für die kritischen Exponenten	8

1 Grundlagen

1.1 Das Ising-Modell

Beim Ising-Modell handelt es sich um ein einfaches Modell zur Beschreibung des Ferromagnetismus, welches von Wilhelm Lenz entwickelt wurde. Im Rahmen des Ising-Modells wird eine Hamiltonfunktion für ein Ensemble von Spins aufgestellt, welche die folgende Form hat:

$$\beta\mathcal{H}(J, h) = -\mathcal{J} \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i.$$

Der erste Summand beschreibt die Wechselwirkung zwischen den Spins, der zweite die Energie, welche aus der Wechselwirkung der Spins mit einem äußeren Feld H resultiert. Die Summation wird im ersten Summanden über nächste Nachbarn durchgeführt, die Kopplung wird als konstant angenommen. Diese Annahmen einer lokalen, isotropen Wechselwirkung stellen die wichtigsten Näherungen des Ising-Modells dar.

In Gleichung (1) wurde eine Skalierung mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$ vorgenommen. Es kann nun im kanonischen Ensemble eine Zustandssumme aufgestellt werden, welche die folgende Form hat:

$$Z(T, J, h) = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta\mathcal{H}(\{s_i\})). \quad (1)$$

Hierbei wird über alle Konfigurationen der N Spins summiert ($\{s_i\} \in \{-1, 1\}^N$). Aus dieser Größe lassen sich einerseits, wie aus der statistischen Physik bekannt, thermodynamische Größen wie das Gibbsche Potential ableiten, andererseits kann mit der Zustandssumme als Normierung ein Wahrscheinlichkeitsmaß definiert werden:

$$P(\{s_i\}) = \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}(\{s_i\}))}{Z}. \quad (2)$$

Hierbei ist $P(\{s_i\})$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Ensemble der Spins die Konfiguration $\{s_i\}$ annimmt. Dieses Wahrscheinlichkeitsmaß erlaubt die Definition von Mittelwerten.

1.2 Kritisches Verhalten bei Ferromagneten

Wir betrachten für ein ferromagnetisches System, wie es zum Beispiel durch das Ising-Modell beschrieben wird, die Isothermen im $M - H$ - Phasenraum. Dabei ist H das äußere Magnetfeld, M ist die Magnetisierung, welche für ein Ensemble von Spins definiert werden kann als:

$$M(H) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i. \quad (3)$$

Die Magnetisierung, welche ohne äußeres Magnetfeld auftritt ($M(H = 0)$) wird als spontane Magnetisierung bezeichnet.

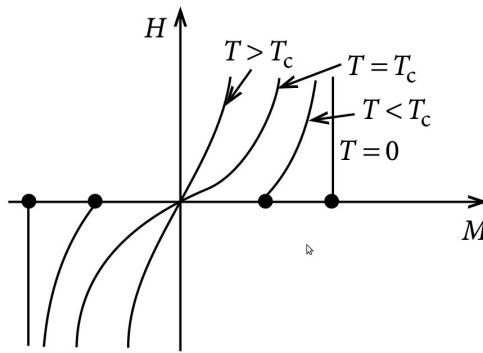


Abbildung 1: Aufhebung der spontanen Magnetisierung bei $T = T_C$

Wie man an Abbildung 1 erkennt, existiert eine sogenannte *kritische Temperatur* T_C oberhalb derer keine spontane Magnetisierung mehr auftritt. Unterhalb der kritischen Temperatur gilt $M(H = 0) = \pm M_S$. Man bezeichnet die spontane Magnetisierung auch als Ordnungparameter des Systems, da das Spinensemble offensichtlich bei $M_S = 0$ keine innere Ordnung mehr aufweist. Der Übergang von einem geordneten System zu einem ungeordneten und andersherum ist zweifelsohne von großem physikalischen Interesse. Speziell für Temperaturen in der Nähe der kritischen können interessante Eigenschaften thermodynamischer Größen festgestellt werden, wie im folgenden Abschnitt genauer ausgeführt werden soll.

1.3 Skalierungsverhalten am kritischen Punkt

Wir wollen die Abhängigkeiten physikalischer Größen von der sogenannten *reduzierten Temperatur* $\epsilon := \frac{T - T_C}{T_C}$ betrachten. Man findet folgendes asymptotisches Verhalten thermodynamischer Größen:

- **Wärmekapazität:** $C_H = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_{H=0} \sim (\pm\epsilon)^{-\alpha}$ (α') für $T \gtrless T_C; H = 0$.
- **Suszeptibilität:** $\chi_T = - \left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_{H=0} \sim (\pm\epsilon)^{-\gamma}$ (γ') für $T \gtrless T_C; H = 0$.
- **Kritische Isotherme:** $H \sim M^\delta$ für $T = T_C$.
- **Ordnungsparameter:** $M(H = 0) = - \frac{\partial G}{\partial H} \Big|_{H=0} \sim (-\epsilon)^\beta$ für $T < T_C$.

Die Tilde sei dabei die Notation für eine asymptotische Annäherung bis auf einen konstanten Faktor. Die hier auftretenden Exponenten $\alpha, \alpha', \gamma, \dots$ werden als *kritische Exponenten* bezeichnet. Offensichtlich ist es von großem Interesse Relationen zwischen den Exponenten zu ermitteln, welche dann experimentell überprüft werden können. Wie man erkennt, können alle oben aufgeführten thermodynamischen Größen aus dem Gibbschen

Potential hergeleitet werden. Unter der Annahme, dass das Gibbssche Potential eine verallgemeinerte homogene Funktion in ϵ und h ist, also dass

$$G(\lambda^a \epsilon, \lambda^b h) = \lambda G(\epsilon, h), \quad (4)$$

können folgende Relationen aufgestellt werden:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = (\geq)2 \quad \leftrightarrow \text{Rushbrooke-Ungleichung} \quad (5)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = (\geq)2 \quad \leftrightarrow \text{Griffiths-Ungleichung} \quad (6)$$

$$\gamma = (\geq)\beta(\delta - 1) \quad \leftrightarrow \text{Widom-Ungleichung} \quad (7)$$

$$\alpha' = (\geq)\alpha; \quad (8)$$

$$\gamma' = \gamma. \quad (9)$$

Diese Gleichungen haben ohne die Annahme der Homogenität herleitbare Analoga in Form von Ungleichungen (siehe Klammern). Die entsprechenden Namen sind jeweils hinter den Gleichungen notiert. Die Annahme der Homogenität des Gibbsschen Potentials kann im Rahmen der Kadanoff-Blockspin-Konstruktion im Detail motiviert werden. Weitere wichtige Größen, welche im Rahmen der Blockspin-Konstruktion behandelt werden können, und die ein Skalierungsverhalten in der Nähe des kritischen Punktes aufweisen sind die Spin-Spin-Paarkorrelation und die zugeordnete Korrelationslänge. Mit Hilfe des in (2) eingeführten Wahrscheinlichkeitsmaßes kann die Korrelationsfunktion zwischen zwei Spins wie folgt definiert werden:

$$\Gamma(r, \epsilon) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s \rangle^2; \quad s_{i/j} = s(\mathbf{R}_i/\mathbf{j}) \text{ mit } r = \frac{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|}{a} \text{ (Homogenität!)} \quad (10)$$

$$a : \text{Gitterkonstante} \quad (11)$$

Aufgrund der Annahme eines homogenen und isotropen Systems ist die Korrelationsfunktion als Funktion des auf die Gitterkonstante normierten Abstands wohldefiniert. Die klassische *Ornstein-Zernike-Theorie* sagt in der Nähe des kritischen Punktes folgende funktionale Form voraus:

$$\Gamma(r, \epsilon) \approx \Gamma_0 \frac{\exp(-r/\xi(\epsilon))}{r}. \quad (12)$$

Hier beschreibt die Größe $\xi(\epsilon)$ die Breite der Exponentialfunktion und damit die Reichweite der Korrelation und wird als *Korrelationslänge* bezeichnet. Auch die Korrelationsfunktion bzw. Länge weisen in der Nähe des kritischen Punktes ein Skalierungsverhalten mit zugeordneten kritischen Exponenten auf:

- **Korrelationslänge:** $\xi \sim (\pm\epsilon)^{-\nu} (\nu')$ für $T \gtrless T_C; H = 0 \Rightarrow \xi(T) \xrightarrow{T \rightarrow T_C} \infty$.

- **Korrelationsfunktion** (in Dimension d): $\Gamma(r, \epsilon = 0) \approx \frac{1}{r^{d-3+\eta}}$ für $H = 0$.

Zu beachten ist die Divergenz der Korrelationslänge am kritischen Punkt, welche auch anschaulich klar ist, da an diesem Punkt durch Korrelationen ein ungeordnetes System in ein langreichweitig geordnetes übergeht. In den folgenden Abschnitten soll auch für die Korrelationsfunktion Γ eine Homogenitätsannahme im Detail motiviert werden, und so Relationen zwischen den Exponenten η, ν, ν' ermittelt werden.

2 Die Kadanoff-Blockspin-Idee

2.1 Das heuristische Argument

Nachdem in den vorigen Abschnitten die notwendigen Grundlagen und Definitionen wiederholt wurden, kommen wir nun zur Blockspin-Idee und zu den daraus folgenden Resultaten. Um die Blockspin-Idee zu motivieren ist es hilfreich die wichtigen Eigenschaften des Spin-Systems in der Nähe des kritischen Punktes zu betrachten.

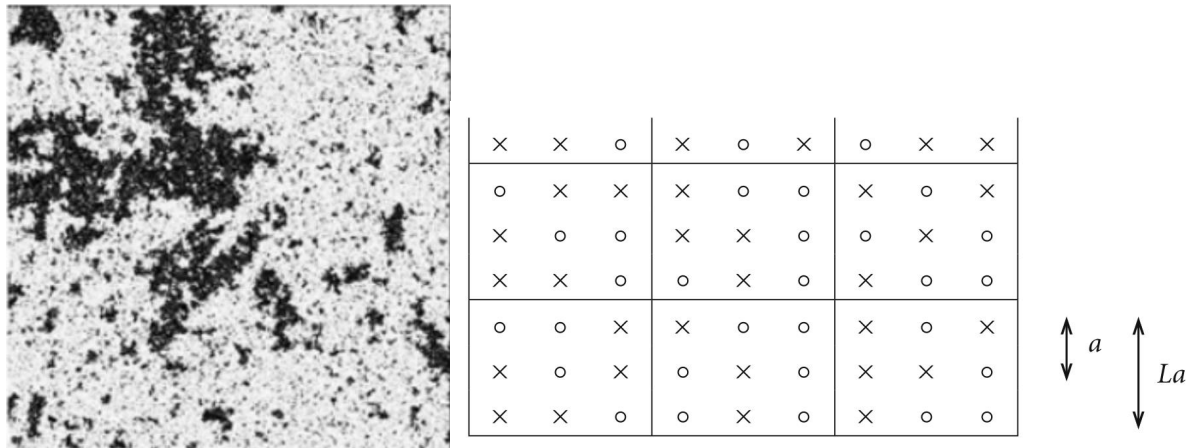


Abbildung 2: Links: Isingsystem am kritischen Punkt; Rechts: Blockspin-Konstruktion [5],[3]

In Abbildung 2 ist eine typische Spinkonfiguration für ein zweidimensionales Isingsystem in der Nähe des kritischen Punktes zu sehen. Ein ähnliches Bild reproduziert sich qualitativ auf allen Skalen, die hinreichend größer als der Gitterabstand sind. Durch die divergierende Korrelationslänge werden die natürlichen Skalen des Systems aufgehoben und man spricht im statistischen Sinne von einem *skaleninvarianten System*.

Die zweite wichtige Eigenschaft, welche in Abbildung 2 sichtbar wird, ist die *Clusterbildung*, welche ebenfalls auf die divergierende Korrelationslänge zurückzuführen ist. Diese Cluster bilden sich auf allen Skalen und es ist je nach Skala nicht mehr zu unterscheiden zwischen Clustern von Einzelspins oder Clustern von *Blöcken* von Spins. Ein Blockspin lässt sich zum Beispiel wie in Abbildung 2 (rechts) ersichtlich konstruieren. In dieser Konstruktion enthält ein Blockspin offensichtlich L^d Einzelspins. Die oben aufgeführten Eigenschaften des Isingsystems in der Nähe des kritischen Punktes führten Kadanoff zur folgenden fundamentalen Annahme:

In der Nähe des kritischen Punktes verhält sich ein *Blockspin* der Länge $a \ll La \ll \xi$ wie ein Isingspin.

Diese Annahme bedeutet insbesondere, dass sich im *Blockspin-Bild* (im Folgenden sind Größen im Blockspin-Bild stets mit einer Tilde gekennzeichnet) eine Hamiltonfunktion $\tilde{\mathcal{H}}$ von der gleichen funktionalen Form wie die Hamiltonfunktion im Isingspin-Bild schreiben lässt:

$$\beta\tilde{\mathcal{H}} = -\tilde{\mathcal{J}} \sum_{\langle\alpha,\beta\rangle} \tilde{s}_\alpha \tilde{s}_\beta - \tilde{h} \sum_{\alpha=1}^n \tilde{s}_\alpha. \quad (13)$$

Dabei sind offensichtlich die Konstanten $\tilde{\mathcal{J}}, \tilde{h}$ anzupassen. Mathematisch ist die Zusammenfassung mehrerer Spins im zweiten Summanden trivial und auch ohne die oben genannte Annahme möglich. Die Annahme, dass sich Blockspins \tilde{s}_α wie Isingspins verhalten, geht in der Vernachlässigung nichtlinearer Terme im ersten Summanden ein. Durch die divergierende Korrelationslänge am kritischen Punkt können die Details der Wechselwirkungen von Spins untereinander innerhalb eines Blockspins vernachlässigt werden.

2.2 Anwendungen

Wie oben erwähnt, kann die Blockspin-Konstruktion insbesondere verwendet werden, um zu zeigen, dass sich das Gibbssche Potential $G(\epsilon, h)$ und die Korrelationsfunktion $\Gamma(r, \epsilon)$ wie verallgemeinerte homogene Funktionen verhalten. Dies soll im Folgenden im Detail ausgeführt werden.

2.2.1 Das Gibbssche Potential

Wir betrachten das Gibbssche Potential pro Blockspin ($\tilde{g}(\epsilon, h)$) und nehmen an, dass sich auch für dieses Potential die funktionale Form durch den Übergang in das Blockspin-Bild nicht ändert:

$$\tilde{g}(\epsilon, h) = g(\tilde{\epsilon}, \tilde{h}). \quad (14)$$

Um das Gibbssche Potential pro Blockspin mit dem entsprechenden Potential pro Isingspin in Verbindung zu bringen, lässt sich ausnutzen, dass es sich hier um eine extensive Größe handelt, woraus sofort folgt:

$$\tilde{g}(\epsilon, h) = g(\tilde{\epsilon}, \tilde{h}) = L^d g(\epsilon, h). \quad (15)$$

Zu bestimmen sind nun die Transformationen $\tilde{\epsilon} \leftrightarrow \epsilon$ und $\tilde{h} \leftrightarrow h$. Da die Transformationen nur von der Skalierung L abhängen dürfen und $\epsilon \rightarrow 0 \Leftrightarrow \tilde{\epsilon} \rightarrow 0$ sowie $h \rightarrow 0 \Leftrightarrow \tilde{h} \rightarrow 0$ erfüllt sein müssen, wird folgender Ansatz gewählt:

$$\tilde{\epsilon} = p(L)\epsilon \quad (16)$$

$$\tilde{h} = f(L)h. \quad (17)$$

Für die Funktionen $p(L)$ und $f(L)$ kann nun eine sehr einfache Funktionalgleichung aufgestellt werden. Hierzu nutzt man aus, dass eine zweifache Reskalierung (mit L und mit M) folgende Relationen liefert:

$$(LM)^d g(\epsilon, h) = g(p(L)p(M)\epsilon, f(L)f(M)h) = g(p(LM)\epsilon, f(LM)h)$$

$$\Rightarrow p(LM) = p(L)p(M) \quad f(LM) = f(L)f(M).$$

Zusammen mit der Nebenbedingung $p(1) = f(1) = 1$ sind dies lösbar Funktionalgleichungen, aus denen

$$p(L) = L^y \quad f(L) = L^x \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2 \quad (18)$$

folgt. Einsetzen in Gleichung (15) liefert dann die Homogenitätsrelation für $G(\epsilon, h)$:

$$G(\lambda^a \epsilon, \lambda^b h) = \lambda G(\epsilon, h) \quad \text{mit} \quad \lambda := L^d \quad a = \frac{y}{d} \quad b = \frac{x}{d} \quad (19)$$

Als Einschränkung bleibt die oben genannte Bedingung $a \ll La \ll \xi$ zu beachten, welche aber auf Grund der divergierenden Korrelationslänge für fast alle L erfüllt ist.

2.2.2 Die Korrelationsfunktion

Auch die Paarkorrelationsfunktion soll nun im Blockspin-Bild dargestellt werden. Auch hier wird wieder im Geiste der zentralen Annahme folgender Ansatz gewählt:

$$\tilde{\Gamma}(r, \epsilon) = \Gamma(\tilde{r}, \tilde{\epsilon}) = \langle \tilde{s}_\alpha \tilde{s}_\beta \rangle - \langle \tilde{s} \rangle^2 \quad \text{mit} \quad \tilde{r} = \frac{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|}{La} = \frac{r}{L} \quad (20)$$

Der Zusammenhang zwischen \tilde{r} und r ergibt sich sofort aus geometrischen Überlegungen. Gesucht ist nun der Zusammenhang zwischen $\tilde{\Gamma}(r, \epsilon) = \Gamma(\tilde{r}, \tilde{\epsilon})$ und $\Gamma(r, \epsilon)$. Hierzu führen wir folgende Normierung ein:

$$L^{-d} \sum_{i \in \alpha} s_i = \mathcal{A} \tilde{s}_\alpha. \quad (21)$$

Dabei kann die Normierungskonstante \mathcal{A} folgendermaßen bestimmt werden:

$$\tilde{h} \sum_{\alpha} \tilde{s}_\alpha = h \sum_{\alpha} \sum_{i \in \alpha} s_i = hL^d \mathcal{A} \sum_{\alpha} \tilde{s}_\alpha \quad \underset{\tilde{h} = L^x h}{\Rightarrow} \quad \mathcal{A} = L^{x-d}. \quad (22)$$

Hier wurde ausgenutzt, dass der Energiebeitrag durch das äußere Magnetfeld in beiden Bildern gleich sein muss, ebenso wie der bereits bekannte Zusammenhang zwischen \tilde{h} und h . Die Summation im Index α läuft über alle Blockspins, im Index i über alle Isingspins. Mit Hilfe der Normierung (21) können nun die in der Definition der Korrelationsfunktionen auftretenden statistischen Mittelwerte miteinander in Verbindung gebracht werden:

$$\langle \tilde{s} \rangle^2 = \langle \tilde{s}_\alpha \rangle^2 = \left(L^{-x} \sum_{i \in \alpha} \langle s_i \rangle \right)^2 = L^{-2(x-d)} \langle s \rangle^2 \quad (23)$$

$$\langle \tilde{s}_\alpha \tilde{s}_\beta \rangle = L^{2x} \sum_{i \in \alpha} \sum_{j \in \beta} \langle s_i s_j \rangle = L^{-2(x-d)} \langle s_i s_j \rangle. \quad (24)$$

Eingesetzt in die Korrelationsfunktionen ergibt sich damit der Zusammenhang:

$$\Gamma(\tilde{r}, \tilde{\epsilon}) = \Gamma\left(\frac{r}{L}, L^y \epsilon\right) = L^{-2(x-d)} \Gamma(r, \epsilon), \quad (25)$$

womit gezeigt ist, dass auch die Korrelationsfunktion im Rahmen der Kadanoff-Blockspin-Konstruktion unter der Einschränkung $a \ll La \ll \xi$ eine homogene Funktion ist. Es gilt nach einfachen Ersetzungen:

$$\Gamma(\lambda^q r, \lambda^v \epsilon) = \lambda \Gamma(r, \epsilon) \quad \text{mit} \quad \lambda := L^{-2(x-d)}; q = \frac{1}{2(x-d)}; v = -\frac{y}{2(x-d)}. \quad (26)$$

2.2.3 Folgerungen für die kritischen Exponenten

Aus der Tatsache, dass sich das Gibbssche Potential und die Korrelationsfunktion wie verallgemeinerte homogene Funktionen verhalten, lassen sich nun wie bereits erwähnt Zusammenhänge zwischen den kritischen Exponenten herleiten. Das Prinzip soll hier an den beiden kritischen Exponenten ξ und ν gezeigt werden. Diese waren definiert über

$$\xi \sim (\pm\epsilon)^{-\nu} \quad (\nu') \quad \text{für } T \gtrsim T_C; \quad \Gamma(r, \epsilon) \sim \frac{1}{r^{d-3+\eta}}. \quad (27)$$

Einsetzen von $\epsilon = 0$; $\lambda = r^{-2(x-d)}$ in Gleichung (26) liefert:

$$\Gamma(r, 0) = r^{2(x-d)} \Gamma(1, 0). \Rightarrow d - 3 + \eta = -2(x-d). \quad (28)$$

Setzt man $\lambda = (\pm\epsilon)^{2(x-d)/y}$ in Gleichung (26) ein, so liefert dies zusammen mit der Ornstein-Zernike Formel:

$$\nu = \nu' = \frac{1}{y}. \quad (29)$$

In sehr ähnlicher Weise können aus der Homogenität des Gibbsschen Potentials Zusammenhänge zwischen x, y und den kritischen Exponenten $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ hergeleitet werden. Diese führen zum einen auf die bereits erwähnten Gleichungen (6)-(9), zum anderen kombiniert mit (28) und (29) auf die Identität

$$d \frac{\delta - 1}{\delta + 1} = (\geq) 2 - \eta = (\leq) \frac{d\gamma}{2\beta + \gamma}, \quad (30)$$

welche ein exaktes Analogon in Form der *Buckingham-Gunton-Ungleichungen* hat.

Literatur

- [1] Weidlich, W.: *Thermodynamik und statistische Mechanik* Ak. Verlagsgesellschaft Wiesbaden, 1976.
- [2] Stanley, H. E.: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* Oxford University Press, 1990.
- [3] Nolting, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik* Springer, 2007.
- [4] Khajehpour, M.,R.,H.: *Introductory Lectures on Critical Phenomena* in Path Integral Method, Lattice Gauge Theory and Critical Phenomena (Editor A. Shaukat), World Scientific 1987.
- [5] Douglas Ashton: *Scale invariance in critical Ising model*, Youtube-Video vom 18.10.2010.