8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

V. Konum Uzayı Renormalizasyon Gurubu

V.A Ağ Modelleri

Wilson'un tedirgemeli RGsi kritik özellikleri yoklamada sistematik bir yaklaşım olsa da, ϵ açılımını yüksek mertebelere kadar yapmak oldukça zahmetlidir. Kesikli bir ağ üzerinde tanımlanan modeller, RG yaklaşımını tamamlayan alternatif hesaplama yöntemleri sunar. Evrensellikten dolayı, ne kadar basitleştirilmiş de olsa, uygun mikroskopik simetrilere ve etkileşme erimlerine sahip modellerin, aynı kritik üstelleri öngörmesini bekleriz. Ağ modelleri, görselleştirme, bilgisayar uyarlamaları ve seri açılımı amaçları için uygundur. Bundan dolayı, her ağ noktasına uygun bir "spin" serbestlik derecesi yerleştirilmiş, ve spinlerin basit etkileşim enerjileri olan modelleri tasvir edeceğiz. Bu tarz modeller açık 'mikroskopik' serbestlik dereceleri cinsinden oluşturulsa da, karmaşıklıklarına bağlı olarak, bazı malzemelerın tanımında Landau-Ginzburg modelinden daha doğru bir tanım veredebilir, vermeyedebilir. Buradaki nokta, evrenselliğin, iki tanımın da aynı *makroskopik* fiziği tasvir etmesini gerektirdiği, ve sürekli veya kesikli model tercihinin, sadece hesaplamaya uygunlukla ilgili olduğudur. Sıkça kullanılan bazı ağ modelleri aşağıda tasvir edilmiştir:

1. *İsing Modeli*, istatistiksel mekanikte en basit ve en yaygın uygulanan örneklemelerden biridir. Ağın her i noktasında, sadece $+1$ ve -1 olarak iki farklı değeri olan bir σ_i spini vardır. Her durum, ikili bir alaşımdaki türlerden birine, ya da etkileşen bir gazda ağ yaklaşımındaki dolu ya da boş hücrelere karşılık gelebilir. Olası en basit *kısa erimli* etkileşme sadece birbirlerine komşu spinleri içerir, ve

$$\mathcal{H} = \sum_{<i,j>} \hat{B}(\sigma_i, \sigma_j) \tag{V.1}$$

Hamiltoniyeni ile tasvir edilebilir; buradaki $< i, j >$ gösterimi, bütün *en yakın komşu* çiftleri üzerinden toplamı göstermek için yaygın olarak kullanılır. $\sigma_i^2 = 1$ olduğu için, iki spin arasındaki en genel etkileşim

$$\hat{B}(\sigma, \sigma') = -\hat{g} - \frac{\hat{h}}{z}(\sigma + \sigma') - J\sigma\sigma' \tag{V.2}$$

olur. N tane spin için, 2^N tane *mikro-durum* vardır ve (Gibbs) bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left[K \sum_{<i,j>} \sigma_i\sigma_j + h\sum_i \sigma_i + g\right] \tag{V.3}$$

olarak verilir, burada $K = \beta J$, $h = \beta\hat{h}$ ve $g = \beta\hat{g}$ ($\beta = 1/k_BT$ ve z her konum için bağ sayısıdır, yani, ağın koordinasyon sayısı) olarak tanımlanmıştır. $T = 0$'da $h = 0$ için, temel durumun bütün spinlerin yukarı ya da aşağıya doğru olduğu, iki kat yozlaşması vardır ($K > 0$). Bu düzen, kritik $K_c = J/k_B T_c$'de, düzensiz faza bir faz geçişiyle bozulur. h alanı *yukarı-aşağı simetri*sini bozar ve faz geçişini kaldırır. g parametresi sadece enerjinin orijinini kaydırır, ve mikrodurumların göreceli ağırlıklarını, veya makroskopik özellikleri etkilemez.

Bütün aşağıdaki modeller, İsing modelinin genelleştirilmeleri olarak görülebilir.

2. *$O(n)$ modeli:* Her ağ konumuna, n-bileşenli bir *birim* vektör yerleştirilmiştir, yani

$$S_i \equiv (S_i^1, S_i^2, \cdots, S_i^n), \quad \sum_{\alpha=1}^{n} (S_i^\alpha)^2 = 1 \text{ olmak üzere} \tag{V.4}$$

En yakın komşu etkileşimi

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<i,j>} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \hat{\vec{h}} \cdot \sum_i \vec{S}_i \tag{V.5}$$

olarak yazılabilir. Aslında, küresel simetri ile tutarlı en genel etkileşme, f herhangi bir fonksiyon olmak üzere, $f(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)$ şeklinde yazılabilir. Benzer şekilde, *dönme simetrisi* pek çok "alan" tarafından, $\sum_i (\vec{h}_p \cdot \vec{S}_i)^p$ şeklinde bozulabilir. Özel durumları, İsing modeli ($n = 1$),*XY model*i ($n = 2$), ve *Heisenberg model*idir ($n = 3$).

3. *Potts Modeli:* Ağın her konumuna q-değerli bir spin $S_i \equiv 1,\ 2,\ \cdots,\ q$ yerleştirilmiştir. Spinler arası etkileşim

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<i,j>} \delta_{S_i,S_j} - \hat{h} \sum_i \delta_{S_i,1} \tag{V.6}$$

tarafından tasvir edilir. Şimdi, h alanı q-durumları arasında *sıra değiştirme* simetrisini kırar. İsing modeli, $q = 2$ için yeniden elde edilir, çünkü $\delta_{\sigma,\sigma'} = (1+\sigma\sigma')/2$. 3 durumlu Potts modeli, mesela, bir kübün yüzlerinden biri boyunca deformasyonunu tasvir edebilir. $q > 3$ olan Potts modelleri, $O(n)$ tarafından kapsanmayan yeni evrensellik sınıflarını belirler. Gerçekten, $d = 2$'de $q \geq 4$ için ve $d = 3$'de $q > 3$ için geçişler süreksizdir.

4. *Spin s-modelleri:* Her konumdaki spin, $2s + 1$ değer alır, $s_i = -s, -s+1, \cdots, +s$. Genel bir en yakın komşu Hamiltoniyen'i

$$\mathcal{H} = \sum_{<i,j>} (J_1 s_i s_j + J_2 (s_i s_j)^2 + \cdots + J_{2s} (s_i s_j)^{2s}) - \hat{h} \sum_i s_i \tag{V.7}$$

olur. İsing modeli $s = 1/2$'ye karşılık gelirken, $s = 1$ Blume-Emery-Griffith (BEG) modeli olarak bilinir. Manyetik olmayan ($s = 0$) ve manyetik ($s = \pm 1$) elementlerin karışımını tasvir eder. Bu model, sürekli ve süreksiz geçişleri birbirinden ayıran üçlü-kritik nokta gösterir. Ancak, düzenli faz, yukarı-aşağı simetrisini kırdığı için, faz geçişi, bütün s değerleri için, İsing evrensellik sınıfına aittir.

Kesikli modelleri incelemede kullanılan bazı hesaplama araçları:

1. *Konum Uzayı Renormalizasyonu:* Bunlar, Kadanoff'un RG şemasının ağ modellerine uygulanmasıdır. Etkileşim uzayını baş edilebilir tutmak için bazı yaklaşıklıklar genelde gereklidir. Bu tür yaklaşıklıkların çoğu kontrol edilemez, onlardan bir kısmı burada tartışılacak.

2. *Seri Açılımı:* Düşük sıcaklık açılımı, düzenli temel durumdan başlar ve etrafındaki en düşük enerjili uyarımları inceler. Yüksek sıcaklık açılımı sonsuz sıcaklıktaki birbirleriye etkileşmeyen spin topluluğu ile başlar, ve spinler arası etkileşimleri, tedirgemeyle dahil eder. Kritik davranış, bu tarz serilerin tekilliklerinden elde edilir.
3. *Kesin sonuçlar*, ağ modellerinin çok sınırlı bir alt kümesi için elde edilebilir. Bunlar, problem çözme saatinda aktarma matrisi yöntemi ile çözülecek olan tek boyutlu zincirleri, ve derste daha sonra anlatılacak iki boyutlu İsing modelini içerir.
4.*Monte-Carlo Simülasyonları:* Bu yöntemlerin amacı, doğru Boltzman ağırlığı $\exp(-\beta\mathcal{H})$ ile yaratılmış spin dağılımları yaratmaktır. Bu amaca ulaşmak için çeşitli yöntemler vardır, en bilineni Metropolis algoritmasıdır. Çeşitli beklenen değerler ve bağdaşıklık fonksiyonları, bu dizilimlerden doğrudan hesaplanır. Gittikçe artan bilgisayar kuvvetiyle, sayısal simulasyonlar daha da popüler olmuştur. Bu yöntemin sınırları, incelenebilen sistemin boyutları, ve doğru ağırlıklandırılmış dizilimlerin elde edilmesi için gereken süreyle ilgilidir. Sayısal simülasyonlarla ilgili yaygın bir literatür vardır ve bu derste daha fazla tartışılmayacaktır.

V.B $d = 1$'de Kesin Hesap

Tek boyutta, en yakın komşu etkileşimli İsing modeli için (denklem V.1) için kesin RG işlemi yapılabilir. Temel fikir, serbestlik derecesi sayısını b çarpanı kadar azaltırken, bölüşüm fonksiyonunu koruyan bir dönüşüm bulmaktır, yani

$$Z = \sum_{\{\sigma_i | i=1,\cdots,N\}} e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma_i]} = \sum_{\{\sigma'_{i'} | i'=1,\cdots,N/b\}} e^{-\beta\mathcal{H}'\left[\sigma'_{i'}\right]} \tag{V.8}$$

Bu koşulu sağlayan pek çok $\{\sigma_i\} \mapsto \{\sigma'_{i'}\}$ eşleştirmesi vardır. Dolayısıyla, Dönüşüm tercihi, elde edilen RG denklemlerinin basitliği rehber alınarak yapılır. $b = 2$ için, mesela, olası bir tercih, komşu spinleri guruplayıp, renormalize edilmiş spini, ortalamaları olarak tanımlamaktır. Bu *çoğunluk kuralı*, $\sigma_i = (\sigma_{2i-1} + \sigma_{2i})/2$, aslında en uygunu değildir, çünkü elde edilen spinlerin olası üç değeri $(0, \pm1)$ varken, ilk spinler iki değerlidir. Bu belirsizliği, iki spinden birine, mesela σ_{2i-1}, toplam spin sıfır ise, eşitlik bozucu rolü vererek kaldırabiliriz. Bu durumda, dönüşüm, basitçe $\sigma'_i = \sigma_{2i-1}$ olur. Bu tarz bir RG işlemi, etkin olarak, çift numaralı spinleri kaldırır, ve genellikle *kırım* olarak adlandırılır. İlk modeldeki gibi, $\sigma' = \pm1$ olduğu için, herhangi bir ζ renormalizasyon çarpanına gerek yoktur. Etkileşme yan yana komşular arasında olduğu için, bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}}^{N} \exp\left[\sum_{i=1}^{N} B(\sigma_i, \sigma_{i+1})\right] = \sum_{\{\sigma'_i\}}^{N/2} \sum_{\{s_i\}}^{N/2} \exp\left[\sum_{i=1}^{N/2} \left[B(\sigma'_i, s_i) + B(s_i, \sigma'_{i+1})\right]\right] \tag{V.9}$$

olarak yazılabilir. Kırılmış $\{s_i\}$ spinleri üzerinden toplarsak

$$e^{-\beta\mathcal{H}'\left[\sigma'_i\right]} \equiv \prod_{i=1}^{N/2} \left[\sum_{s_i=\pm1} e^{\left[B(\sigma'_i, s_i) + B(s_i, \sigma'_{i+1}\right]}\right] \equiv e^{\sum_{i=1}^{N/2} B'(\sigma'_i, \sigma'_{i+1})} \tag{V.10}$$

elde ederiz, burada denklem V.2'yi takip edersek,

$$B(\sigma_1, \sigma_2) = g + \frac{h}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) + K\sigma_1\sigma_2 \tag{V.11}$$

ve

$$B'(\sigma_1', \sigma_2') = g' + \frac{h'}{2}(\sigma_1' + \sigma_2') + K'\sigma_1'\sigma_2' \tag{V.12}$$

İsing spinleri için en genel etkileşme şeklidir. Denklem V.10'dan, renormalize edilmiş etkileşimler

$$\begin{aligned} R(\sigma_1', \sigma_2') &\equiv \exp\left[K'\sigma_1'\sigma_2' + \frac{h'}{2}(\sigma_1' + \sigma_2') + g'\right] \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \exp\left[K s_1(\sigma_1' + \sigma_2') + \frac{h}{2}(\sigma_1' + \sigma_2') + h s_1 + 2g\right] \end{aligned} \tag{V.13}$$

ifadesinden elde edilir. Renormalize edilmiş etkileşimleri çözmek için,

$$\begin{cases} x = e^K, \quad y = e^h, \quad z = e^g \\ x' = e^{K'}, \quad y' = e^{h'}, \quad z' = e^{g'} \end{cases} \tag{V.14}$$

olarak seçmek uygundur. Bağın dört olası dizilimi

$$\begin{cases} R(+,+) = x'y'z' = z^2 y(x^2 y + x^{-2}y^{-1}) \\ R(-,-) = x'y'^{-1}z' = z^2 y^{-1}(x^{-2}y + x^2 y^{-1}) \\ R(+,-) = x'^{-1}z' = z^2(y + y^{-1}) \\ R(-,+) = x'^{-1}z' = z^2(y + y^{-1}) \end{cases} \tag{V.15}$$

olarak verilir. Son iki denklem özdeştir, sonuç olarak üç bilinmeyenli üç denklemimiz vardır ve çözümleri

$$\begin{cases} z'^4 = z^8(x^2 y + x^{-2}y^{-1})(x^{-2}y + x^2 y^{-1})(y + y^{-1})^2 \\ y'^2 = y^2 \frac{x^2 y + x^{-2}y^{-1}}{x^{-2}y + x^2 y^{-1}} \\ x'^4 = \frac{(x^2 y + x^{-2}y^{-1})(x^{-2}y + x^2 y^{-1})}{(y + y^{-1})^2} \end{cases} \tag{V.16}$$

olur. Logaritmalarını alarak, yineleme bağıntılarını

$$\begin{cases} g' = 2g + \delta g(K, h) \\ h' = h + \delta h(K, h) \\ K' = K'(K, h) \end{cases} \tag{V.17}$$

şeklinde buluruz. g parametresi, sadece Hamiltoniyen'e eklenen bir sabittir. Olasılıkları etkilemez, ve dolayısıyla, K ve h için yineleme bağıntılarında görünmez. $\delta g(K, h)$ kırılan spinlerin genel serbest enerjiye olan katkısıdır.

1. *Sabit Noktalar:* $h = 0$ alt uzayı simetri yüzünden kapalıdır, ve $y = 1$ için denklemler V.16'nın

$y' = 1$ ve

$$e^{4K'} = \left(\frac{e^{2K} + e^{-2K}}{2}\right)^2, \quad \Longrightarrow \quad K' = \frac{1}{2}\ln\cosh 2K \tag{V.18}$$

anlamına geldiği kontrol edilebilir. K için yineleme bağıntısının aşağıdaki sabit noktaları vardır:

(a) $K^* = 0$'da, düzensiz fazın *gider*i olan bir sonsuz sıcaklık sabit noktası. Eğer K küçükse, $K' \approx \ln(1+4K^2/2)/2 \approx K^2$ daha da küçüktür ki bu sıfır bağdaşıklık uzunluğu olan *kararlı* bir sabit nokta olduğu anlamına gelir.

(b) $K^* \to \infty$'de düzenli fazı tasvir eden, bir sıfır sıcaklık sabit noktası. Büyük, fakat sonlu bir K için, renormalize edilmiş etkileşim $K' \approx \ln(e^{2K}/2)/2 \approx K - \ln 2/2$ biraz daha küçüktür. Dolayısıyla, bu sabit nokta sonsuz bağdaşıklık uzunluğuna sahip ve kararsızdır.

Açıkça, herhangi sonlu bir etkileşim, sıfıra renormalize olur, ki bu da tek boyutlu zincirin yeterince uzun uzunluk ölçeklerinde her zaman için düzensiz olduğu anlamına gelir. Başka bir sabit noktanın olmadığı, denklem V.18'in başka bir şekilde $\tanh K' = (\tanh K)^2$ olarak yazılabileceğine dikkat edince açıkça görülür.

2. *Akış Diyagramları*, h alanının varlığında, bütün akışların, $K^* = 0$ ve herhangi bir h^* değerine sahip olan sabit noktalar çizgisinde bittiklerini gösterir. Bu sabit noktalar, birbirinden *bağımsız* spinleri tasvir eder ve hepsinin sıfır bağdaşıklık uzunluğu vardır. Akışlar, $K^* = h^* = 0$ sabit noktasından başlarlar ve (K, h) parametre uzayında iki kararsız doğrultuları vardır.

3. Yineleme bağıntılarını bu $(x \to \infty)$ sabit nokta civarında *doğrusallaştırırsak*

$$\begin{cases} x'^4 \approx x^4/4 \\ y'^2 \approx y^4 \end{cases}, \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} e^{-K'} & = & \sqrt{2}e^{-K} \\ h' & = & 2h \end{cases} \tag{V.19}$$

elde ederiz. Dolayısıyla, e^{-K} ve h'yi ölçeklenme alanı olarak düşünebiliriz. $\xi' = \xi/2$ olduğu için, sabit noktanın civarında, bağdaşıklık uzunluğu

$$\begin{aligned} \xi\left(e^{-K}, h\right) &= 2\xi\left(\sqrt{2}e^{-K}, 2h\right) \\ &= 2^\ell \xi\left(2^{\ell/2}e^{-K}, 2^\ell h\right) \end{aligned} \tag{V.20}$$

homojen ölçeklenme şeklini $(b = 2)$ sağlar. İkinci denklem, RG işlemini ℓ defa tekrarlayarak elde edilmiştir. ℓ'i $2^{\ell/2}e^{-K} \approx 1$ olacak şekilde seçersek,

$$\xi(e^{-K}, h) = e^{2K} g_\xi(he^{2K}) \tag{V.21}$$

ölçeklenme şeklini elde ederiz. $h = 0$'da, $T = 0$'a yaklaşırken, bağdaşıklık uzunluğu ıraksar. Ancak, ıraksaması, sıcaklığın bir kuvvet yasası şeklinde değildir. Bundan dolayı, $T = 0$'a ($1/K$ veya e^{-K}) yakınlık ölçüsü tercihiyle ilgili ν üstelini seçmede bir belirsizlik vardır.

Üstünölçeklenme varsayımı, d boyutta, serbest enerjinin tekil kısmının ξ^{-d} ile orantılı olduğunu söyler. Dolayısıyla

$$f_{\text{tekil}}(K, h) \propto \xi^{-1} = e^{-2K} g_f(he^{2K}) \tag{V.22}$$

olmasını bekleriz. Sıfır alanda, mıknatıslanma her zaman sıfırken, alınganlık

$$\chi(K) \sim \left.\frac{\partial^2 f}{\partial^2 h}\right|_{h+0} \sim e^{2K} \tag{V.23}$$

olarak davranır. Sıfır sıcaklığa yaklaşırken, alınganlığın ıraksaması, bağdaşıklık uzunluğununki ile orantılıdır. $\langle s_i, s_{i+x}\rangle \sim e^{-x/\xi}/x^{d-2+\eta}$ ve $\chi \sim \int d^d\mathbf{x}\langle s_0 s_{\mathbf{x}}\rangle_c \sim \xi^{2-\eta}$ genel ifadelerini kullanırsak, $\eta = 1$ sonucuna ulaşırız.

Tek boyutlu İsing modeli, problem çözme saatlerinda daha detaylı tartışalacak olan, *aktarma matrisi metodu* kullanılarak kesin olarak çözülebilir. Doğrudan çözümün sonuçları, RG ile elde edilenlerle tam uyum içindedir. Aktarma matrisi yaklaşımı, herhangi bir tek boyutlu, en yakın komşu etkileşimli zincire uygulanabilir, çünkü bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp\left[\sum_{i=1}^{N} B(s_i, s_{i+1})\right] = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1}^{N} e^{B(s_i,s_{i+1})} \tag{V.24}$$

şeklinde yazılabilir. *Aktarma matrisi*ni

$$\langle s_i \mid T \mid s_j\rangle = e^{B(s_i,s_j)} \tag{V.25}$$

olarak tanımlayarak, ve *tekrarlanan sınır koşulları*nı kullanırsak,

$$Z = \text{İz}\left[T^N\right] \approx \lambda^N_{\text{en büyük}} \tag{V.26}$$

elde ederiz. $N \to \infty$ iken, izin, en büyük öz değer $\Lambda_{\text{en büyük}}$ tarafından belirlendiğine dikkat ediniz. *Frobenius'un Teoremi*, bize, elemanları pozitif olan herhangi bir sonlu matrisin en büyük özdeğerinin yoz olmadığını söyler. Bu ise, $\Lambda_{\text{en büyük}}$ ve Z'nin, B'deki parametrelerin analitik fonksiyonları olduğu ve tek boyutlu modellerin sadece sıfır sıcaklıkta tekillik (ve dolayısıyla faz geçişi) sergileyebilecekleri anlamına gelir. Aktarma matrisi metodu, bütün böyle tek boyutlu zincirler için alternatif bir RG şeması sağlar. b çarpanı ile kırım için, $Z = \text{İz}\left[(T^b)^{N/b}\right]$ ifadesini, yeniden ölçeklenmiş bağ enerjisini tanımlamak için kullanabiliriz:

$$e^{B(s'_i,s'_j)} \equiv \langle s'_i \mid T' \mid s'_j\rangle = \langle s'_i \mid T^b \mid s'_j\rangle \tag{V.27}$$