8.334 İstatistiksel Mekanik II: Alanların İstatistiksel Fiziği
2008 Bahar

V.C Niemeijer-van Leeuwen Kümülant Yaklaştırması

Maalesef, kırım işlemi, yüksek boyutlarda tam olarak uygulanamaz. Örnek olarak, kare ağ iki alt ağa bölünebilir. $b = \sqrt{2}$ ile RG için, bir alt ağdaki spinleri kırarak başlayabiliriz. Her kırılan spinin, etrafındaki dört spinle olan etkileşimleri denklem V.13'ü genelleşirerek elde edebiliriz. Eğer başlangıçta $h = g = 0$ ise,

$$R(\sigma_1', \sigma_2', \sigma_3', \sigma_4') = \sum_{s=\pm1} e^{Ks(\sigma_1'+\sigma_2'+\sigma_3'+\sigma_4')} = 2\cosh\left[K(\sigma_1' + \sigma_2' + \sigma_3' + \sigma_4')\right] \quad \text{(V.28)}$$

elde ederiz. Açıkça, yukarıdaki ifadede, dört spin simetrik olarak bulunur, ve dolayısıyla, aynı iki cisim etkileşimlerine maruzdurlar. Bu, renormalize edilmiş ağda, köşegenler boyunca yeni etkileşimlerin de yaratıldığı, ve ilk Hamiltoniyen'in en yakın komşu formunun korunmadığı anlamına gelir. Ayrıca, dört nokta etkileşimi de vardır, ve

$$R = \exp\left[g' + K'(\sigma_1'\sigma_2' + \sigma_2'\sigma_3' + \sigma_3'\sigma_4' + \sigma_4'\sigma_1' + \sigma_1'\sigma_3' + \sigma_2'\sigma_4') + K_4'\sigma_1'\sigma_2'\sigma_3'\sigma_3'\right] \quad \text{(V.29)}$$

RG'nin her adımında, yeni etkileşimlerin sayısı (ve erimi) artar ve bir tür kesme yaklaşımına ihtiyaç vardır. İleriki kısımlarda, böyle iki şema tanımlanacaktır.

İlk yaklaşımlardan biri Niemeijer ve van Leeuwen (NvL) tarafından *üçgen ağ* üzerindeki, $-\beta\mathcal{H} = K\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j$ en yakın komşu etkileşme Hamiltoniyen'ine sahip İsing modeli için geliştirilmiştir. İlk ağın konumları, üç spinden oluşan (mesela değişen yukarı yöndeki üçgenler) *hücrelere* guruplanmıştır. α hücresindeki üç spini $\{\sigma_\alpha^1, \sigma_\alpha^2, \sigma_\alpha^2\}$ olarak belirtirsek, renormalize edilmiş hücrelerin spinini *çoğunluk kuralı* kullanarak tanımlayabiliriz:

$$\sigma_\alpha' = \text{sign}\left[\sigma_\alpha^1 + \sigma_\alpha^2 + \sigma_\alpha^3\right] \quad \text{(V.30)}$$

(Tek sayıda konum için kuralda bir belirsizlik yoktur, ve renormalize edilmiş spin iki değerlidir.) Yukarıdaki eşleşmeye karşılık gelen renormalize edilmiş etkileşimler,

$$e^{-\beta\mathcal{H}'[\sigma_\alpha']} = \sum_{\{\sigma_\alpha^i \mapsto \sigma_\alpha'\}}{}' e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma_\alpha^i]} \quad \text{(V.31)}$$

sınırlanmış toplamından elde edilir.

Hamiltoniyen'deki etkileşimlerin sayısını kesmek için, NvL $\beta\mathcal{H} = \beta\mathcal{H}_0 + \mathcal{U}$ olacak şekilde tedirgemeli bir şema tanımladılar. Tedirgenmemiş Hamiltoniyen

$$-\beta\mathcal{H}_0 = K\sum_\alpha\left(\sigma_\alpha^1\sigma_\alpha^2 + \sigma_\alpha^2\sigma_\alpha^3 + \sigma_\alpha^3\sigma_\alpha^1\right) \quad \text{(V.32)}$$

sadece *hücre içi etkileşimler*i içerir. Hücreler birbirlerinden bağımsız olduklarından, Hamiltoniyen'in bu kısmı tam olarak hesaplanabilir. Geri kalan *hücreler arası etkileşimler*, tedirgemeyle hesaplanırlar

$$-\mathcal{U} = K\sum_{<\alpha,\beta>}\left(\sigma_\beta^{(1)}\sigma_\alpha^{(2)} + \sigma_\beta^{(1)}\sigma_\alpha^{(3)}\right) \quad \text{(V.33)}$$

Toplam, iki bağ ile bağlanmış bütün komşu hücreler üzerindendir. (İlgili gerçek spinler, hücrelerin yönelimine bağlıdır.) Şimdi, denklem V.32, tedirgemeyle hesaplanır:

$$e^{-\beta\mathcal{H}'[\sigma'_\alpha]} = \sum_{\{\sigma^i_\alpha \mapsto \sigma'_\alpha\}}' e^{-\beta\mathcal{H}_0[\sigma^i_\alpha]}\left[1 - \mathcal{U} + \frac{\mathcal{U}^2}{2} - \cdots\right] \tag{V.34}$$

Renormalize edilmiş Hamiltoniyen, kümülant serisi ile elde edilir:

$$\beta\mathcal{H}'\left[\sigma'_\alpha\right] = -\ln Z_0\left[\sigma'_\alpha\right] + \langle\mathcal{U}\rangle_0 - \frac{1}{2}\left(\langle\mathcal{U}^2\rangle_0 - \langle\mathcal{U}\rangle_0^2\right) + \mathcal{O}(\mathcal{U}^3) \tag{V.35}$$

burada $\langle\rangle_0$, $\beta\mathcal{H}_0$'ya göre, sabit $[\sigma'_\alpha]$ koşuluyla hesaplanan beklenen değerlerdir, ve Z_0 karşılık gelen bölüşüm fonksiyonudur.

Devam etmek için, bir hücredeki spinlerin bütün olası dizilimleri, renormalize edilmiş değerleri, ve hücre enerjisine katkılarını gösteren bir tablo oluşturalım:

	σ'_α	σ^1_α	σ^2_α	σ^3_α	$\exp[-\beta\mathcal{H}_0]$	
	$+$	$+$	$+$	$+$	e^{3K}	
	$+$	$-$	$+$	$+$	e^{-K}	
	$+$	$+$	$-$	$+$	e^{-K}	
	$+$	$+$	$+$	$-$	e^{-K}	
	$-$	$-$	$-$	$-$	e^{3K}	
	$-$	$+$	$-$	$-$	e^{-K}	
	$-$	$-$	$+$	$-$	e^{-K}	
	$-$	$-$	$-$	$+$	e^{-K}	

Sınırlandırılmış bölüşüm fonksiyonu, bağımsız hücrelerin katkılarının çarpımıdır

$$Z_0\left[\sigma'_\alpha\right] = \prod_\alpha\left[\sum_{\{\sigma^i_\alpha \mapsto \sigma'_\alpha\}}' e^{K(\sigma^1_\alpha\sigma^2_\alpha + \sigma^2_\alpha\sigma^3_\alpha + \sigma^3_\alpha\sigma^1_\alpha)}\right] = \left(e^{3K} + 3e^{-K}\right)^{N/3} \tag{V.36}$$

$[\sigma'_\alpha]$'dan *bağımsızdır*, dolayısıyla, Hamiltoniyen'e eklenen bir sabit olur. Etkileşimlerin ilk kümülantı

$$-\langle\mathcal{U}\rangle_0 = K\sum_{<\alpha,\beta>}\left[\langle\sigma^1_\beta\rangle_0\langle\sigma^2_\alpha\rangle_0 + \langle\sigma^1_\beta\rangle_0\langle\sigma^3_\alpha\rangle_0\right] = 2K\sum_{<\alpha,\beta>}\langle\sigma^i_\alpha\rangle_0\left\langle\sigma^j_\beta\right\rangle_0 \tag{V.37}$$

olur, burada her hücredeki üç spinin denkliğinden faydalandık. Tabloyu kullanarak, konum spinlerinin sınırlandırılmış ortalamalarını hesaplayabiliriz:

$$\langle\sigma^i_\alpha\rangle_0 = \left\{\begin{array}{ll}\frac{+e^{3K} - e^{-K} + 2e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} & \sigma'_\alpha = +1 \text{ için} \\ \frac{-e^{3K} + e^{-K} - 2e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} & \sigma'_\alpha = -1 \text{ için}\end{array}\right\} \equiv \frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}}\sigma'_\alpha \tag{V.38}$$

Denklem V.37'ye yerleştirirsek

$$-\beta\mathcal{H}'\left[\sigma'_\alpha\right] = \frac{N}{3}\ln\left(e^{3K} + 3e^{-K}\right) + 2K\left(\frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}}\right)^2\sum_{\langle\alpha\beta\rangle}\sigma'_\alpha\sigma'_\beta + \mathcal{O}(\mathcal{U}^2) \tag{V.39}$$

Bu mertebede, renormalize edilmiş Hamiltoniyen, sadece en yakın komşu etkileşimleri içerir, ve yineleme bağıntısı

$$K' = 2K\left(\frac{e^{3K}+e^{-K}}{e^{3K}+3e^{-K}}\right)^2 \tag{V.40}$$

olarak verilir.
1. Denklem V.40, aşağıdaki *sabit noktalara* sahiptir:

(a) $K^* = 0$'da yüksek sıcaklık gideri. Eğer $K \ll 1$ ise, $K' \approx 2K(2/4) = K/2 < K$, yani bu sabit nokta *kararlıdır*, ve sıfır bağdaşıklık uzunluğu vardır.

(b) $K^* = \infty$'de düşük sıcaklık gideri. Eğer $K \gg 1$ ise, $K' \approx 2K > K$, yani, tek boyuttakinden farklı olarak, bu sabit nokta da kararlıdır ve sıfır bağdaşıklık uzunluğu vardır.

(c) Yukarıdaki iki sabit nokta da kararsız olduğu için, sonlu $K' = K = K^*$ olacak şekilde en azından bir tane *kararlı* sabit nokta olması gerekir. Denklem V.40'dan, sabit nokta konumu

$$\frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{e^{3K^*}+e^{-K^*}}{e^{3K^*}+3e^{-K^*}}, \qquad \Longrightarrow \sqrt{2}e^{4K^*}+\sqrt{2} = e^{4K^*}+3 \tag{V.41}$$

koşulunu sağlar. Sabit noktanın değeri

$$K^* = \frac{1}{4}\ln\left(\frac{3-\sqrt{2}}{\sqrt{2}-1}\right) \approx 0.3356 \tag{V.42}$$

üçgen ağ için tam olarak bilinen değeri 0.2747 ile kıyaslanabilir.

2. Yineleme bağıntısını, banal olmayan sabit nokta civarında doğrusallaştırırsak:

$$\left.\frac{\partial K'}{\partial K}\right|_{K^*} = 2\left(\frac{e^{4K^*}+1}{e^{4K^*}+3}\right)^2 + 32K^*e^{4K^*}\frac{(e^{4K^*}+1)}{(e^{4K^*}+3)^3} \approx 1.624 \tag{V.43}$$

elde ederiz. Sabit nokta, akışların sürekliliğinin gerektirdiği gibi, gerçekten de kararsızdır. Bu renormalizasyon şeması, serbestlik derecelerinin $1/3$'ünü kaldırır, ve $b = \sqrt{3}$'e karşılık gelir. Dolayısıyla, termal özdeğer

$$b^{y_t} = \left.\frac{\partial K'}{\partial K}\right|_{K^*}, \qquad \Longrightarrow y_t \approx \frac{\ln(1.624)}{\ln(\sqrt{3})} \approx 0.883 \tag{V.44}$$

olarak elde edilir. Bu, iki boyutlu İsing modeli için tam olarak bilinen $y_t = 1$ değeri ile kıyaslanabilir. Kesinlikle $y_t = 2$ olan ortalama-alan (Gaussiyan) tahmininden daha iyidir. Bu özdeğerden, üstelleri tahmin edebiliriz:

$$\nu = 1/y_t \approx 1.13 \ \ (1), \quad \text{and} \quad \alpha = 2 - 2/y_t = -0.26 \ \ (0)$$

burada, tam değerler parantez içinde verilmiştir.

3. Üstellerin hesabını tamamlamak için, *manyetik özdeğer* y_h'ye ihtiyacımız var, ki Hamiltoniyen'e manyetik alanı ekledikten sonra elde edilir, yani

$$\beta\mathcal{H} = \beta\mathcal{H}_0 + \mathcal{U} - h\sum_i \sigma_\alpha^i \tag{V.45}$$

ifadesinden. Sabit nokta $h^* = 0$'da olduğu için, eklenen terim de tedirgemeyle hesaplanabilir, ve en düşük mertebede

$$\beta\mathcal{H}' = \beta\mathcal{H}_0 + \langle\mathcal{U}\rangle_0 - h\sum_\alpha \langle(\sigma_\alpha^1 + \sigma_\alpha^2 + \sigma_\alpha^3)\rangle_0 \tag{V.46}$$

burada, spinler, hücrelerine göre guruplanmıştır. Denklem V.38'i kullanarak

$$\beta\mathcal{H}' = \ln Z_0 + K' \sum_{<\alpha,\beta>} \sigma'_\alpha \sigma'_\beta - 3h\sum_\alpha \left(\frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}}\right)\sigma'_\alpha \tag{V.47}$$

dolayısıyla, renormalize edilmiş manyetik alan

$$h' = 3h\left(\frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}}\right) \tag{V.48}$$

olarak elde edilir. Kararsız sabit nokta civarında,

$$b^{y_h} = \left.\frac{\partial h'}{\partial h}\right|_{K^*} = 3\frac{e^{4K^*} + 1}{e^{4K^*} + 3} = \frac{3}{\sqrt{2}} \tag{V.49}$$

ve

$$y_h = \frac{\ln(3/\sqrt{2})}{\ln(\sqrt{3})} \approx 1.37 \tag{V.50}$$

Bu, $y_h = 1.875$ tam değerinden daha azdır. (Bu durumda, Gaussiyan değeri $y_h = 2$ doğru cevaba daha yakındır.)
4. NvL, yaklaşımı $\mathcal{U}$'da ikinci mertebeye kadar yapmışlardır. Bu mertebede, daha uzak komşu spinler üzerinden iki yeni etkileşim yaratılır. Bu üç parametre uzayında, yineleme bağıntılarının, bir tane kararsız doğrultusu olan, bir tane banal olmayan sabit noktası vardır. Elde edilen $y_t = 1.053$ özdeğeri, ümit verecek kadar doğru 1 değerine yakındır, ancak bu uyum muhtemelen bir rastlantıdır..

V.D Migdal-Kadanoff Bağ Taşıma Yaklaştırması

Kare bir ağda tanımlı İsing modeli için, $b = 2$ olan RG ele alın, ki her ağ doğrultusunda, spinler birer atlayarak kırıma uğrasın. Daha önce de belirtildiği gibi, bu tür kırımlar kalan spinler arasında yeni etkileşimler yaratır. O zaman, renormalize edilmiş spinler, en yakın komşularına iki arka arkaya bağ ile bağlıdırlar. Kırımdan sonra, renormalize edilmiş bağ, tek boyutlu zincir için karakteristik olan, denklem V.18'deki yineleme bağıntısı ile verilir. İstenmeyen bağları kaldırmak, sistemi, tek boyutlu davranmaya başlayacak kadar zayıflatır. Bu, istenmeyen bağları, geri kalanları kuvvetlendirmek için kullanarak tedavi edilir. Kalan spinler artık bir çift ikili bağ (kuvveti $2K$ olan) ile bağlanmışlardır, ve kırım

$$K' = \frac{1}{2}\ln\cosh(2\times 2K) \tag{V.51}$$

verir.

1. Bu yineleme bağıntısının sabit noktaları:

(a) $K^* = 0$: $K \ll 1$ için, $K' \approx \ln(1+8K^2)/2 \approx 4K^2 \ll K$, yani, bu sabit nokta kararlıdır.

(b) $K^* \to \infty$: $K \gg 1$ için, $K' \approx \ln(e^{4K}/2)/2 \approx 2K \ll K$, ki bu da düşük sıcaklık giderinin de kararlı olduğuna işaret eder.

(c) Yukardaki giderlerin çekme bölgesi, birbirlerinden üçüncü bir sabit noktayla ayrılmıştır:

$$e^{2K^*} = \frac{e^{4K^*}+e^{-4K^*}}{2}, \qquad \Longrightarrow K^* \approx 0.305 \tag{V.52}$$

ki bu da tam $K_c \approx 0.441$ değeri ile kıyaslanabilir.

2. Denklem V.51'i sabit nokta civarında doğrusallaştırmak

$$b^{y_t} = \left.\frac{\partial K'}{\partial K}\right|_{K^*} = 2\tanh 4K^* \approx 1.6786, \qquad \Longrightarrow \quad y_t \approx 0.747 \tag{V.53}$$

verir, ki tam değeri $y_t = 1$'dir.

Bağ taşıma işlemi *daha yüksek boyutlar*a genişletilebilir. d boyuttaki hiperkubik bir ağ için, bağ taşıma adımı, her bağı 2^{d-1} çarpanıyla kuvvetlendirir. Kırımdan sonra, yineleme bağıntısı

$$K' = \frac{1}{2}\ln\cosh\left[2\times 2^{d-1}K\right] \tag{V.54}$$

olarak verilir. $K^* = 0$ ve $K^* \to \infty$'deki yüksek ve düşük sıcaklık giderleri kararlıdır, çünkü

$$K \ll 1, \qquad \Longrightarrow \qquad K' \approx \frac{1}{2}\ln(1+2^{2d-1}K^2) \approx 2^{2(d-1)}K^2 \ll K \tag{V.55}$$

ve

$$K \gg 1, \qquad \Longrightarrow \qquad K' \approx \frac{1}{2}\ln\frac{e^{2^dK}}{2} \approx 2^{d-1}K \gg K \tag{V.56}$$

(Yukarıdaki sonucun, İsing modelinin alt kritik boyutunu doğru olarak, ki düşük sıcaklık gideri sadece $d > 1$ için kararlıdır, belirlediğine dikkat edin.) Aradaki sabit noktanın özdeğeri

$$2^{y_t} = \left.\frac{\partial K'}{\partial K}\right|_{K^*} = 2^{d-1}\tanh(2^dK^*) \tag{V.57}$$

olur. $d = 3$ için elde edilen $K^* \approx 0.064$ ve $y_t \approx 0.934$ değerleri, kübik ağ için bilinen $K_c \approx 0.222$ ve $y_t \approx 1.59$ değerleriyle kıyaslanabilir. Açıkça yaklaştırma, daha yüksek boyutlarda daha da kötüleşir. (Üst kritik boyut bulmakta başarısız olur, ve $d \to \infty$ iken $K^* \to 2^{2(1-d)}$ ve $y_t \to 1$)

Migdal-Kadanoff şeması, daha genel spin sistemlerine de uygulanabilir. $\{K\}$ etkileşim kümesi tarafından tanımlanan tek boyutlu bir model için, denklem V.2'deki aktarma matrisi metodu

$$T_b'(\{K'\}) = T(\{K\})^b$$

gibi bir yineleme bağıntısı verir. d boyutlu bir ağ için, ağ taşıma adımı, her ağı b^{d-1} çarpanıyla kuvvetlendirir, ve genelleştirilmiş Migdal-Kadanoff yineleme bağıntıları

$$T_b'(\{K'\}) = T(\{b^{d-1}K\})^b \tag{V.58}$$

olarak verilir.

Yukarıdaki denklemler, faz diyagramlarını ve üstelleri tahmin etmek için hızlı bir yol olarak kullanılabilir. $d = 1$'de işlem kesindir, ve daha yüksek boyutlarda, gittikçe kötüleşir. Bundan dolayı, daha yüksek boyutlarda daha güvenilir olan ortalama-alan (semer noktası) yaklaşımlarını tamamlarlar. Neyazık ki, sonuçlarını geliştirmek için sistematik bir şema geliştirmek mümkün değildir. RG işlemi, serbest enerjileri, ısı sığalarını ve diğer termodinamik fonksiyonları hesaplamayı da mümkün kılar. Bir olası endişe, RG şemalarını kurarken yapılan yaklaştırmaların, fiziksel olmayan davranışlara yol açmasıdır, mesela C ve χ tepki fonksiyonları için negatif değerler. Aslında, bu yineleme bağıntıları (mesela V.58) *hiyerarşik*(Berker) ağlarında kesindir. Bu tür ağların gerçekleşebilir olması, yineleme bağıntılarının hiçbir fiziksel olmayan sonucunun olmadığını garantiler.