28 Renormierungsgruppe

28.a Grundidee

Wir haben im vorhergehenden Abschnitt ein intuitives Bild für die Homogenitätsgesetze entwickelt. In diesem Abschnitt wollen wir es mit Renormierungsgruppenideen begründen. Die Beobachtung, dass die Korrelationsfunktion am kritischen Punkt skaleninvariant ist, lässt vermuten, dass auch die effektive Wechselwirkung am kritischen Punkt diese Eigenschaft hat. Wir nennen die Prozedur, die die Skala der Wechselwirkung verändert, Renormierungsgruppe (RG). Wir bezeichnen die Hamilton-Funktion mit $\mathcal{H}$ und führen

$$H = \mathcal{H}/(k_{\rm B}T) \tag{28.1}$$

ein. Der Einfachheit halber bezeichnen wir H als Hamilton-Funktion. Die Dichte der freien Energie ist definiert als

$$-F = \frac{1}{V_{\rm P}} \ln \operatorname{tr} \exp(-H). \tag{28.2}$$

Die Renormierungsgruppen-Transformation besteht nun aus zwei Schritten
a) einer Änderung der Längenskala um einen Faktor $b = {\rm e}^l$ in allen linearen Dimensionen. Wir lassen dabei die Zustandssumme $Z = \ln \operatorname{tr} \exp(-H)$ invariant. Da das Volumen um einen Faktor ${\rm e}^{dl}$ schrumpft, gilt für die Dichten F

$$F_0 = {\rm e}^{-dl} F_l. \tag{28.3}$$

b) einer Elimination und/oder Transformation der Freiheitsgrade S, die die freie Energie invariant lässt.

Der zweite Schritt ist notwendig, um einen Hamilton-Operator zu erhalten, der mit dem ursprünglichen verglichen werden kann. Die Dichte der Freiheitsgrade S muss auf die ursprüngliche reduziert werden durch das Ausdünnen der Freiheitsgrade, die Fluktuationen kurzer Wellenlängen beschreiben (Fourier-Komponenten mit großen Wellenlängen). Zum anderen muss das System erweitert werden auf eines mit dem Volumen des ursprünglichen. Dann gibt es eine eins-zu-eins-Entsprechung der ursprünglichen und der neuen Variablen. Wenn wir unser System unter dem Mikroskop betrachten, beobachten wir unter geringerer Vergrösserung weniger Details, was dem Eliminations-Prozess entspricht. Andererseits beobachten wir dann ein größeres Volumen, was der Erweiterung des Volumens entspricht.

Die vollständige RG-Transformation von H_0 nach H_l schreiben wir

$$H_l = R_l(H_0), \quad F(H_0) = {\rm e}^{-dl} F(H_l). \tag{28.4}$$

In vielen Fällen ist es möglich, die RG-Prozedur für infinitesimales l zu formulieren. Dann kann die erste Gleichung (28.4) in differentieller Form geschrieben werden

$$\frac{{\rm d}H}{{\rm d}l} = \mathcal{G}H, \tag{28.5}$$

wobei $\mathcal{G}$ der Generator der Renormierungsgruppe ist. Im allgemeinen wirkt $\mathcal{G}$ nichtlinear auf H.

28.b Fixpunkt, Klassifizierung von Operatoren

Nun machen wir zwei Annahmen:
a) Wir nehmen an, dass es eine Fixpunkt-Hamilton-Funktion H^* gibt,

$$\mathcal{G}H^* = 0. \tag{28.6}$$

H^* ist eine Hamilton-Funktion, die sich auf sich selbst abbildet.
b) Wir nehmen an, dass eine kritische Hamilton-Funktion gegen H^* konvergiert.

$$\lim_{l\to\infty} H_l = H^*. \tag{28.7}$$

Dies ist eine wesentlich schwächere Bedingung als die Forderung die kritische Hamilton-Funktion sei H^*. Die bedingung (28.7) verlangt nur, dass die effektive Wechselwirkung unter der Renormierungsgruppe gegen einen Fixpunkt konvergiert.

Um nun das kritische verhalten zu untersuchen zerlegen wir den Generator $\mathcal{G}$ in den linearen Anteil $\mathcal{L}$ und den Beiträgen höherer Ordnung $\mathcal{Q}$,

$$\mathcal{G}(H^* + \Delta H) = \mathcal{L}\Delta H + \mathcal{Q}(\Delta H), \tag{28.8}$$

wobei $\mathcal{Q}(\Delta H) = O(\Delta H)^2$. Wir definieren nun Eigen-Operatoren (Eigen-Funktionen)

$$\mathcal{L}O_i = y_i O_i \tag{28.9}$$

und nehmen im Folgenden an, dass die Eigen-Operatoren einen kompletten Satz von Operatoren bilden, so dass jede Hamilton-Funktion (jeder Hamilton-Operator) H_0 entwickelt werden kann als

$$H_0 = H^* + \sum_i \mu_i O_i. \tag{28.10}$$

Dann erhalten wir in linearer Ordnung in μ

$$H_l = H^* + \sum_i \mu_i \mathrm{e}^{y_i l} O_i. \tag{28.11}$$

Je nach Eigenwert y unterscheidet man

$$\begin{array}{ll} y > 0 & \text{relevante Operatoren} \\ y = 0 & \text{marginale Operatoren} \\ y < 0 & \text{irrelevante Operatoren.} \end{array} \tag{28.12}$$

Der Gleichung (28.11) entnimmt man unmittelber, dass am kritischen Punkt die Felder (in der Feldtheorie Quellen) μ_i aller relevanten Operatoren verschwinden müssen.

Marginale Operatoren können als relevante oder irrelevante Operatoren agieren. Dies hängt davon ab, ob die nichtlinearen Terme μ_i nach Null oder von Null wegtreiben. Es gibt auch den seltenen Fall, dass ein marginaler Operator eine Linie von Fixpunkten erzeugt wie beim zweidimensionalen Acht-Vertex-Modell.

Es gibt einen speziellen Operator, den konstanten (das heißt den von S unabhängigen) Beitrag $\mu_0 V_\mathrm{P}$, für den formal

$$O_0 = V_\mathrm{P}, \quad y_0 = d \tag{28.13}$$

gilt, da V_P um einen Faktor e^{-dl} schrumpft, was durch ein Anwachsen von μ_0 um einen Faktor e^{dl} kompensiert wird. Das Hinzufügen einer Konstanten ändert am kritischen Verhalten jedoch nichts. Er ist der Ursprung des regulären Anteils der freien Energie.

Die Art des kritischen Verhaltens hängt von der Anzahl der symmetrie-erhaltenden relevanten Operatoren ab. (Symmetrie-erhaltend bedeutet, dass die symmetrie des Hamilton-Operators erhalten bleibt; eine spontan gebrochene Symmetrie des Systems wird dadurch nicht ausgeschlossen.) Entwickeln wir

$$\mathcal{H} = \sum_i \mu_i^0 O_i, \quad H^* = \sum \mu_i^* O_i, \tag{28.14}$$

so erhalten wir

$$\mu_i = \beta\mu_i^0 - \mu_i^*. \tag{28.15}$$

Für einen normalen kritischen Punkt hat man einen relevanten symmetrie-erhaltenden Operator (außer O_0) O_E, der die kritische Temperatur bestimmt

$$\mu_E \equiv \tau = \beta\mu_E^0 - \mu_E^* = (\beta - \beta_\mathrm{c})\mu_E^0, \quad \beta_\mathrm{c} = \frac{\mu_E^*}{\mu_E^0}. \tag{28.16}$$

Grob gesprochen ist O_{E} proporional zu H abzüglich Erwartungswert am kritischen Punkt. An einem trikritischen Punkt hat man zwei relevante symmetrie-erhaltende Operatoren (außer O_0) und folglich zwei Bedingungen für kritisches Verhalten.

Die RG-Prozedur ist nicht eindeutig definiert. Dies hat eine Anzahl von Folgerungen, die wir hier nur aufzählen (F.W., J. Physics C7 (1974) 2098): H^* hängt von der RG-Transformation ab. Variiert man die RG-Transformation infinitesimal, dann ändert sich H^* um Operatoren, die wir redundant nennen. Formal hängen die Exponenten y der redundanten Operatoren von der Wahl der RG ab, aber die redundanten Operatoren tragen nicht zur freien Energie bei. Daher haben die Exponenten der redundanten Operatoren keine physikalische Bedeutung. Die Exponenten der anderen Operatoren sind invariant gegen infinitesimale variationen der RG-Gleichungen.

28.c Skalen der freien Energie

Nehmen wir an, es reiche aus nur zwei Operatoren O_E und den Operator des Ordnungs-Parameters O_h zu berücksichtigen,

$$H_0 = H^* + \tau O_E + hO_h, \tag{28.17}$$

was

$$H_l = H^* + \tau \mathrm{e}^{y_E l} O_E + h\mathrm{e}^{y_h l} O_h \tag{28.18}$$

mit

$$F(\tau, h) = \mathrm{e}^{-dl} F(\tau \mathrm{e}^{y_E l}, h\mathrm{e}^{y_h l}) \tag{28.19}$$

ergibt, was mit $L = \mathrm{e}^l$ mit der Gleichung für den singulären Anteil der freien Energie (27.31) unseres intuitiven Bilds übereinstimmt.

Normalerweise hat man eine unendliche Anzahl von Störungen $\mu_i O_i$ in Gleichung (28.10). Um ihren Effekt auf das Homogenitätsgesetz zu betrachten, fügen wir wenigstens einen hinzu,

$$H_0 = H^* + \tau O_E + hO_h + \mu_i O_i \tag{28.20}$$

und erhalten

$$H_l = H^* + \tau \mathrm{e}^{y_E l} O_E + h\mathrm{e}^{y_h l} O_h + \mu_i \mathrm{e}^{y_i l} O_i, \tag{28.21}$$

$$F(\tau, h, \mu_i) = |\tau|^{d/y_E} F(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, \frac{\mu_i}{|\tau|^{y_i/y_E}}). \tag{28.22}$$

Wir interessieren uns für das kritische Verhalten, das heißt den Limes $\tau \to 0$

$$\lim \frac{\mu_i}{|\tau|^{y_i/y_E}} = \begin{cases} 0 & y_i < 0 \text{ oder } \mu_i = 0 \\ \pm\infty & y_i > 0 \text{ und } \mu_i \neq 0. \end{cases} \tag{28.23}$$

Falls O_i relevant ist, ($y_i > 0$), dann muss μ_i explizit berücksichtigt werden. Für irrelevante Operatoren kann der Term $\mu_i/|\tau|^{y_i/y_E}$ vernachlässigt werden, wenn F nach Potenzen von μ_i entwickelt werden kann. Man beachte, dass die rechte Seite von (28.21) die freie Energie weit entfernt vom kritischen Punkt enthält. Der irrelevante Operator führt zu einer Korrektur zum Skalen-Verhalten

$$F = |\tau|^{d/y_E} F(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, 0) + \mu_i |\tau|^{(d-y_i)/y_E} F'(\pm 1, \frac{h}{|\tau|^{y_h/y_E}}, 0) + ... \tag{28.24}$$

Solch eine Korrektur wurde im superfluiden Helium gefunden (Ahlers, Phys. Rev. A8 (1973) 530).

28.d Korrelationen

Bisher haben wir nur translationsinvariante Operatoren betrachtet. Wir können auch die Eigenwertgleichung für einen lokalen Operator $\tilde{O}_i$ betrachten

$$\mathcal{L}\tilde{O}_i = -x_i \tilde{O}_i. \tag{28.25}$$

Dann ergibt sich in linearer Näherung aus

$$H_0 = H^* + \lambda_i \tilde{O}_i. \tag{28.26}$$

die Hamilton-Funktion

$$H_l = H^* + \lambda_i \mathrm{e}^{-x_i l} \tilde{O}_i. \tag{28.27}$$

An Stelle von $\tilde{O}_i$, das eine Funktion der $S(\mathbf{r}')$ ist, können wir $\tilde{O}_i(\mathbf{r})$, das wir erhalten, indem wir $S(\mathbf{r}')$ durch $S(\mathbf{r}'+\mathbf{r})$ ersetzen. Dieser Operator $\tilde{O}_i(\mathbf{r})$ wirkt in der Umgebung von $\mathbf{r}$. Aus

$$H_0 = H^* + \lambda_i \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \tag{28.28}$$

folgt dann

$$H_l = H^* + \lambda_i \mathrm{e}^{-x_i l} \tilde{O}_i(\mathbf{r}\mathrm{e}^{-l}), \tag{28.29}$$

da die Längenskala unter der RG-Transformation um einen Faktor e^{-l} schrumpft.

Wir können nun die Exponenten x_i und y_i durch Einführen des translationsinvarianten Operators

$$O_i = \int \mathrm{d}^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \tag{28.30}$$

miteinander verknüpfen. Wir erhalten dann aus

$$H_0 = H^* + \mu_i O_i = H^* + \mu_i \int \mathrm{d}^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}) \tag{28.31}$$

die Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H_l &= H^* + \mu_i \mathrm{e}^{-x_i l} \int \mathrm{d}^d r \tilde{O}_i(\mathbf{r}\mathrm{e}^{-l}) \\ &= H^* + \mu_i \mathrm{e}^{(d-x_i)l} \int \mathrm{d}^d (r\mathrm{e}^{-l}) \tilde{O}_i(\mathbf{r}\mathrm{e}^{-l}) \\ &= H^* + \mu_i \mathrm{e}^{(d-x_i)l} O_i. \end{aligned} \tag{28.32}$$

Der Vergleich mit (28.11) ergibt

$$y_i = d - x_i, \tag{28.33}$$

es sei denn das Integral verschwindet, was passiert, wenn man den Gradienten eines Operators $\tilde{O}_i$ betrachtet. Man überzeugt sich in diesem Fall leicht, dass aus (28.29)

$$\mathcal{L}\nabla\tilde{O}_i = -(x_i+1)\nabla\tilde{O}_i \tag{28.34}$$

folgt.

Aus einem Hamilton-Operator

$$H_0 = H^* + \tau O_E + h O_h + \lambda_1 \tilde{O}_h(\mathbf{0}) + \lambda_2 \tilde{O}_h(\mathbf{r}) \tag{28.35}$$

folgt dann

$$H_0 = H^* + \tau \mathrm{e}^{y_E l} O_E + h \mathrm{e}^{y_h l} O_h + \lambda_1 \mathrm{e}^{(y_h-d)l} \tilde{O}_h(\mathbf{0}) + \lambda_2 \mathrm{e}^{(y_h-d)l} \tilde{O}_h(\mathbf{r}). \tag{28.36}$$

Differenzieren wir die zugehörige freie Energie (diesmal nicht die Dichte), so erhalten wir die Korrelationsfunktion

$$G(\mathbf{r},\tau,h) = -\frac{\partial^2}{\partial\lambda_1\partial\lambda_2}(V_0 F(H_0))|_{\lambda_1=\lambda_2=0} \tag{28.37}$$

Da die freie Energie unter der Renormierungs-gruppe erhalten bleibt, $V_0 F(H_0) = V_l F(H_l)$, folgt

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r},\tau,h) &= -\frac{\partial^2}{\partial\lambda_1\partial\lambda_2}(V_l F(H_l))|_{\lambda_1=\lambda_2=0} \\ &= \mathrm{e}^{2(y_h-d)l} G(r\mathrm{e}^{-l}, \tau\mathrm{e}^{y_E l}, h\mathrm{e}^{y_h l}), \end{aligned} \tag{28.38}$$

womit dann auch (27.27) hergeleitet ist.

28.e Nichtlineare Beiträge

Bisher haben wir angenommen, dass wir nur den linearen Term $\mathcal{L}$ des Generators $\mathcal{G}$ berücksichtigen brauchen. Wir wollen nun betrachten, was nicht-lineare Terme bewirken. Dazu nehmen wir auch Beiträge zweiter Ordnung in $\mathcal{G}$ mit und erhalten die Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}\mu_i}{\mathrm{d}l} = y_i\mu_i + \frac{1}{2}\sum_{j,k} a_{i,j,k}\mu_j\mu_k + O(\mu^3) \tag{28.39}$$

28.e.α Nichtlineare Skalenfelder

Wir können nun nicht-lineare Skalenfelder g_i einführen, die exakt

$$\frac{\mathrm{d}g_i}{\mathrm{d}l} = y_i g_i \tag{28.40}$$

genügen sollen, wobei auch diese nach den μ entwickelt werden,

$$g_i = \mu_i + \frac{1}{2}\sum_{j,k} b_{i,j,k}\mu_j\mu_k + O(\mu^3). \tag{28.41}$$

Setzen wir nun (28.41) in (28.40) ein, so folgt

$$y_i\mu_i + \frac{1}{2}\sum_{j,k} a_{i,j,k}\mu_j\mu_k + \frac{1}{2}\sum_{j,k}(y_j + y_k)b_{i,j,k}\mu_j\mu_k = y_i\mu_i + \frac{1}{2}\sum_{j,k} y_i b_{i,j,k}\mu_j\mu_k + O(\mu^3), \tag{28.42}$$

was mit

$$b_{i,j,k} = \frac{a_{i,j,k}}{y_i - y_j - y_k} \tag{28.43}$$

gelöst wird. Solange also jeweils $y_i \neq y_j + y_k$ (und entsprechendes für Terme in höherer Ordnung in μ), kann man diese Skalenfelder g einführen. Für diese gilt exakt

$$F(\dots g_i \dots) = \mathrm{e}^{-dl} F(\dots g_i \mathrm{e}^{y_i l} \dots). \tag{28.44}$$

28.e.β Regulärer Anteil der freien Energie

Addiert man eine Konstante zur Wechselwirkung, so ändert diese nur μ_0 im Beitrag $\mu_0 V_{\mathrm{P}}$ in Gleichung (28.13). Sie wirkt sich aber nicht auf die anderen μ aus. Daher gilt

$$F(g_0 \dots g_i \dots) = g_0 + F(0 \dots g_i \dots) \tag{28.45}$$

Der reguläre Term der freien Energie ist nun

$$F_{\mathrm{reg}} = g_0 = \mu_0 + \frac{1}{2}\sum_{j,k} \frac{a_{0,j,k}}{d - y_j - y_k}\mu_j\mu_k + O(\mu^3), \tag{28.46}$$

während der zweite Beitrag in (28.45) der singuläre Beitrag ist. Der reguläre Beitrag wird in der Regel einen Beitrag proportional τ^2 enthalten, der dann einen Untergrund zur spezifischen Wärme liefert.

28.e.γ Logarithmische spezifische Wärme

Falls der kritische Exponent der spezifischen Wärme verschwindet, $\alpha = 0$, folgt aus (27.35) $2y_E = d$. In diesem Fall kann das Skalenfeld g_0 nicht so einen einfachen Term proportional τ^2 haben, da der Nenner in (28.43) verschwindet. Beschränken wir uns auf das Gleichungssystem

$$\frac{\mathrm{d}\mu_0}{\mathrm{d}l} = d\mu_0 + \frac{1}{2}a_{0,E,E}\tau^2, \quad \frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}l} = y_E\tau, \tag{28.47}$$

so folgt

$$g_0 = \mu_0 - \frac{1}{2} a_{0,E,E}(l - l_0)\tau^2, \quad g_E = \tau. \tag{28.48}$$

Dabei ist l_0 eine Integrationskonstante. Wir können nun, da g_E mit $\mathrm{e}^{dl/2}$ anwächst, $l - l_0 = \frac{2}{d} \ln |g_E| = \frac{2}{d} \ln |\tau|$ schreiben und finden schließlich

$$g_0 = \mu_0 - \frac{1}{d} a_{0,E,E}\tau^2 \ln |\tau|, \quad g_E = \tau. \tag{28.49}$$

Jetzt steckt in dem bisher regulären g_0 die logarithmische Singularität, während der singuläre Anteil $\tau^2 F_{\mathrm{sing}}(\tau = \pm 1)$ einen Sprung in der spezifischen Wärme enthalten kann. Eine logarithmische Singularität der spezifischen Wärme tritt im zweidimensionalen Ising-Modell auf (Onsager). Im Acht-Vertex-Modell (Baxter) findet man logarithmische Singularitäten der Form $(T - T_{\mathrm{c}})^n \ln |T - T_{\mathrm{c}}|$ für gerade n. Die hier gegebene Erklärung findet sich bereits bei Widom und bei Kadanoff.

28.e.δ Marginaler Operator

Interessantes verhalten ergibt sich auch, wenn ein marginaler Operator O_m auftritt, $y_m = 0$. Dann folgt aus

$$\frac{\mathrm{d}\mu_m}{\mathrm{d}l} = \frac{1}{2} a_{mmm}\mu_m^2 \tag{28.50}$$

die Lösung

$$\mu_m(l) = -\frac{2}{a_{mmm}(l + l_0)} = \frac{2\mu_m(0)}{2 - a_{mmm} l \mu_m(0)}. \tag{28.51}$$

Falls $a_{mmm}\mu(0)$ und damit $l_0 = 2/(a\mu_m(0))$ negativ ist, konvergiert $\mu(l)$ (sehr) langsam gegen 0, ist es dagegen positiv, so divergiert es. Hat man nun für τ die Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}l} = y_E \tau + a_{EmE}\mu_m \tau, \tag{28.52}$$

so folgt

$$\tau(l) = \mathrm{e}^{y_E l} \left(\frac{l + l_0}{l_0} \right)^{-2a_{EmE}/a_{mmm}} \tau(0) \tag{28.53}$$

Dies führt dazu, dass man für Erwartungswerte nicht nur Potenzen von τ, sondern auch Potenzen von τ multipliziert mit nicht ganzzahligen Potenzen von $|\ln |\tau||$ erhalten kann. Solche Singularitäten wurden zuerst für das sphärische Modell gefunden, später generell für die S^4-Theorie in $d = 4$ Dimensionen (Larkin und Khmelnitskii), wie auch für die S^6-Theorie in $d = 3$ Dimensionen (Riedel und F.W.). Dies gilt auch in $d = 3$ für bestimmte Systeme mit Dipol-Wechselwirkung.

Literaturangaben in F.W., The Critical State, General Aspects, in C. Domb and M.S. Green (eds.) Phase Transitons and Critical Phenomena, Academic Press, 6 (1976) p.7-124