

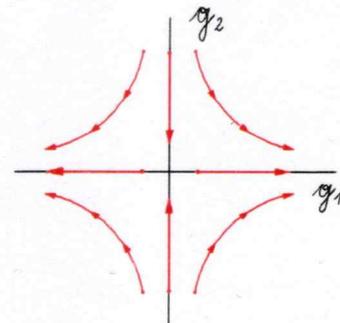
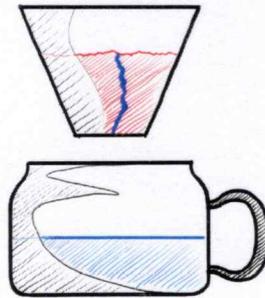
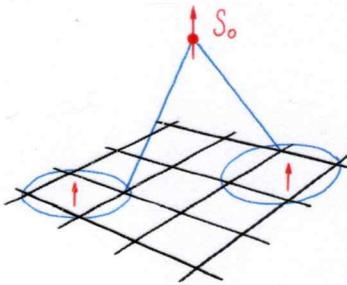
Phasenübergänge und kritische Phänomene

nach Vorlesung von Prof. H.G. Evertz

verfasst von

Michael Draxler, Pascal Heim, Lukas Hörmann, Andreas Jeindl,
Sascha Ranftl, Tobias Russ, Michael Scherbela, Fabian Weissenbacher

SS 2016, Version 1.0



Inhaltsverzeichnis

1 Einführung	5
1.1 Phasenübergänge	5
1.1.1 Beispiel: Flüssigkeit-Gas	5
1.1.2 Beispiel: Ferromagnet	6
1.1.3 Andere Phasenübergänge	7
1.2 Universalität	7
1.2.1 Beispiel: Koexistenzkurven verschiedener Gase und Flüssigkeiten	7
1.2.2 Beispiel: Struktur eines Hamilton-Operators	8
1.3 Mikroskopisches Modell: Ising-Modell	9
2 Die Zustandssumme und ihre Ableitungen, Kritische Exponenten	10
2.1 Thermodynamische Erwartungswerte	10
2.1.1 Zustandssumme	10
2.1.2 Beispiel: Innere Energie	10
2.1.3 Beispiel: Freie Energie	11
2.1.4 Beispiel: Spezifische Wärme	11
2.2 Äußere Felder	11
2.2.1 Linear Response	12
2.3 Fluktuationen	12
2.3.1 Fluktuationen der Inneren Energie	12
2.3.2 Für allgemeine Größen p_i	12
2.4 Korrelationsfunktionen	12
2.4.1 Ohne Wechselwirkung	13
2.4.2 Mit Wechselwirkung	13
2.4.3 Allgemeiner Zugang	14
2.5 Kritische Exponenten	14
2.5.1 Allgemeine Definition eines kritischen Exponenten λ	15
2.5.2 Ungleichungen für die kritischen Exponenten	16
2.6 Zur Renormierungsgruppe	16
3 Modelle und Darstellungen	18
3.1 Ising-Modell	18
3.2 Realisierungen des Ising Modells	19
3.2.1 Magnetische Systeme	19
3.2.2 Binäre Systeme	20
3.2.3 Gitter-Gas-Modell	20
3.3 Potts-Modell	22
3.4 Klassisches Heisenberg- und XY-Modell	22
3.4.1 Spezialfall $J_z = 0$: klassisches XY-Modell	23
3.5 Perkolaton	23
3.5.1 Einfache Modelle	24
3.5.2 Anwendungen, Beispiele	24
3.5.3 Beispiel für eine exakte Lösung	25
3.5.4 Anwendungen der Perkolaton	25

3.6	Ising Modell: Fortuin-Kasteleyn-Darstellung	26
3.6.1	Energie-Erwartungswert in FK-Darstellung	28
3.7	Swendsen-Wang Algorithmus	29
3.7.1	Swendsen-Wang: Programmierung	30
3.8	„Single-Cluster“-Variante von Swendsen Wang	30
3.9	Simulation unendlich großer Systeme mit Cluster-Verfahren	31
3.9.1	Endlich große Systeme	31
3.9.2	Unendlich große Systeme	32
3.10	Systeme mit Magnetfeld ($h > 0$)	34
3.11	Berechnung von Korrelationsfunktion und Suszeptibilität in Cluster-Darstellung	35
3.11.1	Swendsen-Wang	35
3.11.2	Single Cluster	36
3.12	Cluster für $\mathcal{O}(N)$ -Modelle	37
4	Finite Size Scaling (FSS)	39
4.1	Systeme der Größe L^d	39
4.1.1	Suszeptibilität pro Platz	39
4.1.2	Spezifische Wärme	40
4.1.3	Allgemein	41
4.2	Systeme der Größe $(\infty^{d-1}) \cdot L$	41
4.2.1	Beispiele	41
5	Mean Field	42
5.1	Mean Field für das Ising-Modell	42
5.1.1	Magnetisierung in Ising-Modell mit Mean Field	42
5.2	Bethe-Näherung	44
5.3	Mean Field als Variationsansatz	44
5.3.1	Bogoliubov-Ungleichung	45
5.3.2	Anwendung für Mean Field	45
5.3.3	Korrelationsfunktion im Mean-Field Variations-Ansatz	46
5.3.4	Kritische Exponenten im Mean Field	47
5.3.5	Landau Theorie	50
5.4	Landau-Ginzburg Theorie	51
6	Reihenentwicklungen	52
6.1	Tieftemperaturentwicklung des Ising Modells	52
6.2	Hochtemperatur-Darstellung	53
6.2.1	Erwartungswert der inneren Energie	54
6.2.2	Korrelationsfunktion in Hochtemperaturdarstellung	55
6.2.3	Lösung des Ising-Modell in 1D	55
6.3	Dualitätstransformation	56
6.3.1	Ising-Modell auf dem Quadratgitter ($h=0$)	56
7	Transfermatrix	58
7.1	Direkte Lösung bei $h=0$ und obc	58
7.2	Zustandssumme via Transfermatrix	59
7.2.1	Berechnung von Z_N über Diagonalisierung von V	59
7.3	Thermodynamik mittels Transfermatrix	60
7.3.1	Freie Energie	60
7.3.2	Magnetisierung	60
7.3.3	Suszeptibilität	61
7.3.4	Innere Energie	61

7.3.5	Spezifische Wärme	61
7.4	Korrelationsfunktionen mittels Transfermatrix	61
7.4.1	Einplatz-Operator in Transfermatrix	62
7.4.2	Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion in Transfermatrix	62
7.4.3	„Kritische Exponenten des 1D-Ising-Modells“	63
7.5	Verallgemeinerung von Transfermatrizen für „2D“-Systeme	64
8	Renormierungsgruppe	65
8.1	RG-Transformation	65
8.2	RG-Fluss im Parameterraum	66
8.3	Skalenverhalten und kritische Exponenten	69
8.4	Beispiel für eine RG-Rechnung	71
9	Der Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang (topologisch!)	73
9.1	Das klassische 2 Dim XY-Modell	73
9.2	Verwandte Modelle (alle in $d=2$)	76
9.3	Einige Ergebnisse der RG-Analyse	76

Weiteres Buch: Yeomans , Statistical Mechanics of Phase Transitions

1 Einführung

1.1 Phasenübergänge

Phasenübergänge sind Singularitäten der freien Energie oder einer ihrer Ableitungen als Funktion der Temperatur.

1.1.1 Beispiel: Flüssigkeit-Gas

Alle Phasenübergänge in diesem Beispiel (1.1) sind 1. Ordnung da sie einen Sprung in der Dichte, sowie der inneren Energie aufweisen (\Rightarrow latente Wärme). Ausnahme: Am kritischen Punkt findet ein kontinuierlicher Phasenübergang statt, es gibt keine latente Wärme. Der kritische Punkt ist ein spezieller Punkt im Phasendiagramm, da von ihm viele Aussagen über das System abgeleitet werden können.

Für dieses System lässt sich ein Ordnungsparameter $\rho_{fl} - \rho_{gas}$ definieren, welcher für $T > T_c$ null ist. Es gilt für $T < T_c$:

$$\rho_{fl} - \rho_{gas} \propto \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^\beta \quad (1.1)$$

" β " "reduzierte Temp"

wobei β der kritische Exponent des Ordnungsparameters ist. Am kritischen Punkt gibt es eine Singularität, zum Beispiel in der spezifischen Wärme (Abb. 1.2 (c))

$$c_v = \frac{\partial U}{\partial T}$$

$$c_v \propto \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^\alpha \quad (1.2)$$

" α "

wobei α ein weiterer kritischer Exponent ist. Die kritischen Exponenten hängen im Allgemeinen *nicht* von den Materialdetails ab.

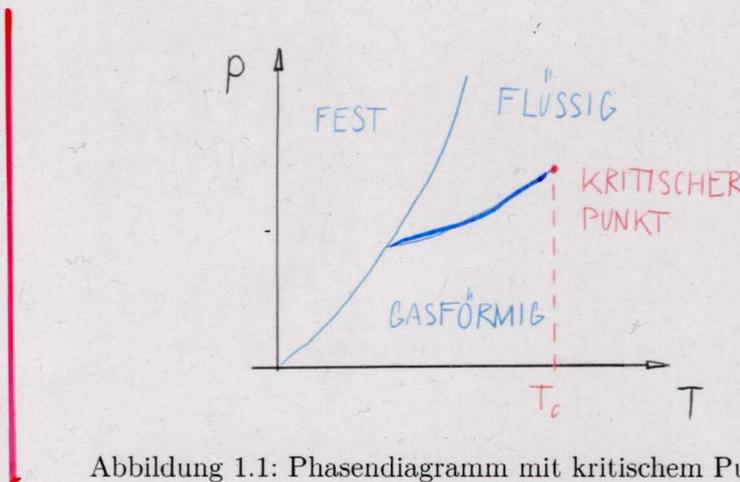


Abbildung 1.1: Phasendiagramm mit kritischem Punkt T_c, p_c

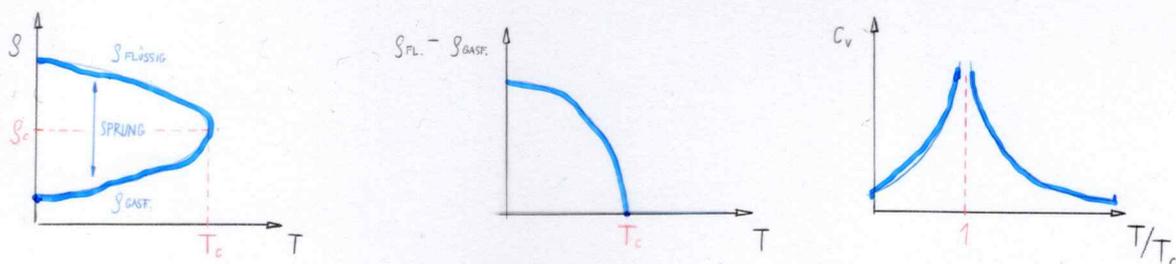


Abbildung 1.2: (a) Dichte über Temperatur. Für $T < T_c$ gibt es einen Sprung in der Dichte. (b) Selbe Information in der Darstellung als Ordnungsparameter $\rho_{fl} - \rho_{gas}$ (c) Singularität in der Wärmekapazität am Phasenübergang

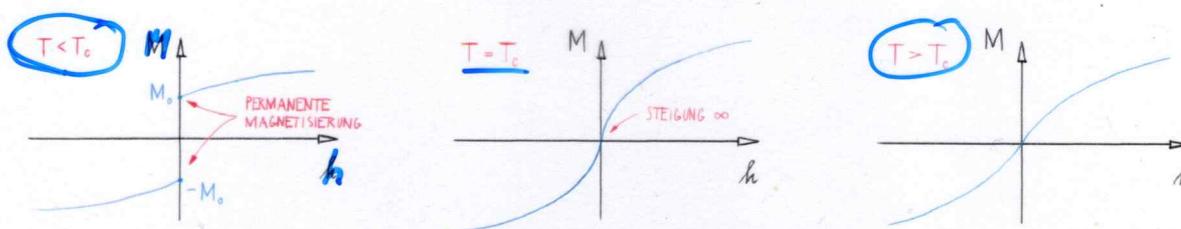


Abbildung 1.3: Magnetisierung M in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld h für ferromagnetisches System für Temperaturen $T < T_c$, $T = T_c$ und $T > T_c$.

1.1.2 Beispiel: Ferromagnet

Beispielsweise Eisen, Kobalt und Nickel. Magnetische Modelle stellen ein einfaches „Standardmodell“ zur Analyse von Phasenübergängen dar.

In Abb. 1.3 ist zu sehen, dass unterhalb einer kritischen Temperatur T_c ein remanentes Magnetfeld M_0 bleibt, auch wenn $h = 0$. Bei $T = T_c$ ist $M_0 = 0$, die Steigung der Magnetisierungskurve ist unendlich. Hier ist allerdings der Ablauf des Experiments von großer Bedeutung, da nur ein remanentes Magnetfeld zurückbleibt, wenn vorher ein entsprechendes Feld angelegt wurde.

Für $T < T_c$ liegt ein Phasenübergang 1. Ordnung vor: Der Ordnungsparameter M_0 springt, sobald h das Vorzeichen wechselt. Bei $T = T_c$ liegt wieder ein kontinuierlicher Phasenübergang

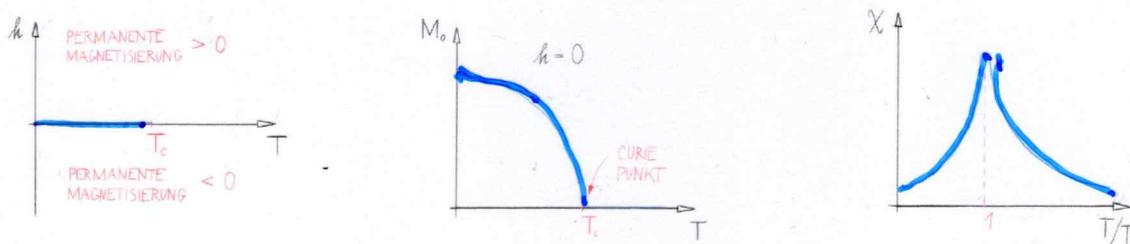


Abbildung 1.4: (a) Phasendiagramm des ferromagnetischen Systems, mit den beiden „Phasen“ $M_0 > 0$ und $M_0 < 0$. (b) Ordnungsparameter M_0 als Funktion der Temperatur. (c) Singularität in der Suszeptibilität χ als Funktion der Temperatur.

vor. Für den Ordnungsparameter gilt analog zum Flüssigkeits-/Gas-Beispiel mit Glg. 1.1 dass der Ordnungsparameter M_0 die Form

$$M_0 \propto \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^\beta \quad (1.3)$$

annimmt, wobei β wieder der kritische Exponent des Ordnungsparameters ist.

Die Suszeptibilität $\chi = \frac{\partial M_0}{\partial h}$ hat eine Singularität als Funktion der Temperatur. (Abb. 1.4 (c))

1.1.3 Andere Phasenübergänge

alle mit dem gleichen Werkzeug beschreibbar

Neben den genannten zwei Beispielen gibt es z.B. auch Phasenübergänge in folgenden Systemen:

- Antiferromagneten
- Ferroelektrika (elektrische Polarisierung)
- Strukturelle Phasenübergänge
- Ordnungs-/Unordnungs-Phasenübergänge (z.B. CuZn: bei $T < T_c$ gibt es strikte Untergitter für Cu und Zn. Über T_c sind Gitterplätze zufällig mit Cu oder Zn besetzt)
- Phasenseparation
- Supraleitung und Suprafluidität
- Flüssigkristalle
- Perkolation
- Oberflächenrauigkeit *"Kaffee"*

(wie 3d Ising!)

SOS (Solid-on-Solid) Modelle zur Oberflächenrauigkeit lassen sich direkt auf XY-Modelle oder Vertex-Modelle abbilden. Auch ein 1D-Spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg Modell besitzt eine Äquivalenz zu einem SOS Modell (auf diese Modelle wird später näher eingegangen).

QM

1.2 Universalität

Nahe T_c , weil dort die "Korrelationslänge" groß ist, viel größer als die mikroskopischen Skalen

Man beobachtet, dass in einem System mit konservativen Kräften die kritischen Exponenten (\leftrightarrow Verhalten bei großen Abständen) nur von Folgendem abhängt (und NICHT von den mikroskopischen Details)

1. Räumliche Dimension des Systems
2. Reichweite der Wechselwirkungen (nur ob „endlich“ oder „unendlich“)
3. Symmetrien des Hamilton-Operators (\leftrightarrow Dimension des Ordnungsparameters)

← ab $\frac{1}{r^2}$

1.2.1 Beispiel: Koexistenzkurven verschiedener Gase und Flüssigkeiten

Auf Grund der Universalität sind die Koexistenzkurven verschiedenster Gase in Abb. 1.5 in der Nähe des kritischen Punkts nahezu identisch. In diesem Beispiel gilt dies sogar weit über den kritischen Bereich hinaus.

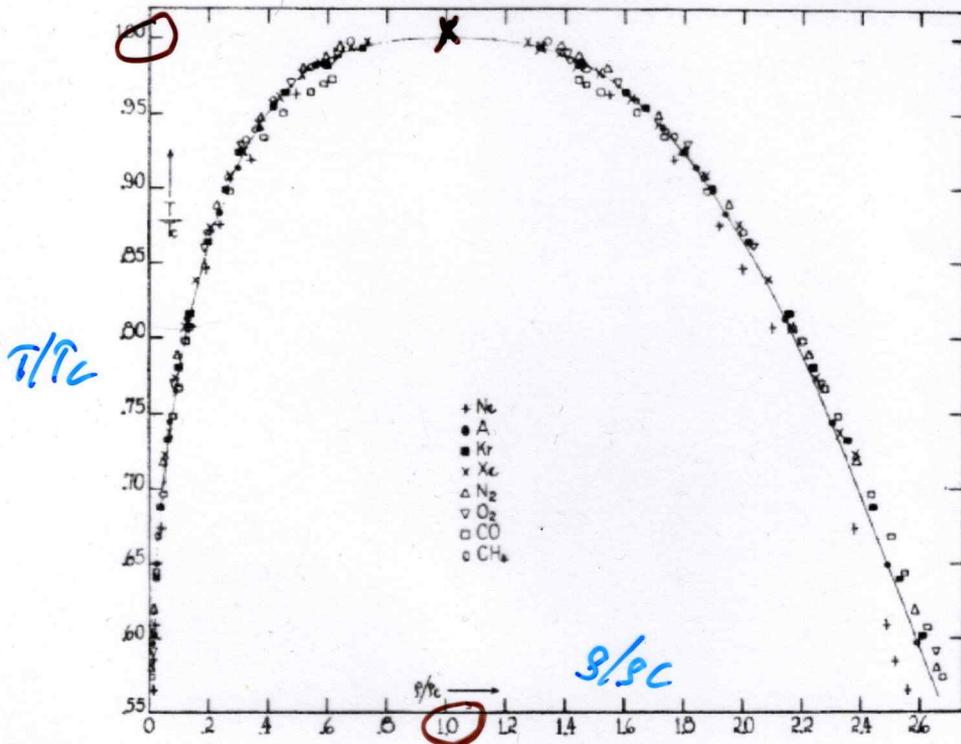


Abbildung 1.5: Skalierte Koexistenzkurven für verschiedene Gase. In diesem Beispiel stimmen die Kurven sogar weit weg vom kritischen Punkt sehr gut überein.

1.2.2 Beispiel: Struktur eines Hamilton-Operators

Ein Hamilton-Operator bestehe aus zwei Teilen: H_0 der eine gewisse Symmetrie aufweise und H_1 der diesbezüglich asymmetrisch sei.

$$H = H_0 + \lambda H_1 \tag{1.4}$$

Es ist zu erwarten, dass nur 2 Sätze von kritischen Exponenten existieren: Ein Satz für $\lambda = 0$ (H symmetrisch) und ein Satz für $\lambda \neq 0$ (H asymmetrisch). Aufgrund der Universalität können Hamilton-Operatoren stark vereinfacht werden, solange die 3 geforderten Eigenschaften (Dimension, Reichweite, Symmetrien) gleich bleiben. Diverse Gase (CO_2 , Xe, etc.) können beispielsweise durch ein 3D Ising Modell beschrieben werden.

+ Magnetismus

Vorsicht beim Vereinfachen von Hamilton-Operatoren:

- Es kann versteckte Symmetrien geben
- In einigen wenigen Fällen gilt die Universalität nicht (z.B. „8-Vertex-Modelle“ und 1D-Spin- $\frac{1}{2}$ Modelle bei $T = 0$)

→ gegen Ende der Vorlesung behandelt

Kosterlitz-Thouless Übergang topologisch!

(Nobel-Preis...)

1.3 Mikroskopisches Modell: Ising-Modell

Es beschreibt z.B. Ferromagneten, Dichte von Flüssigkeiten/Gasen, Ordnung/Unordnung. Zum Beispiel zwei dimensionales quadratisches Gitter: Auf jedem Platz i gibt es eine Variable $s_i = \pm 1$. Energie eines Zustands $\{s_i\}$ ist gegeben durch

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (1.5)$$

wobei $\sum_{\langle ij \rangle}$ eine Summe über benachbarte Plätze beschreibt. Die Wahrscheinlichkeit eines Zustands ist durch das Boltzmann-Gewicht gegeben

$$p \propto e^{-\beta H} \quad (1.6)$$

mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$ der inversen Temperatur. Das Ising-Modell ist ein Standardmodell und exakt nur lösbar in 1D, sowie in 2D für quadratische Gitter bei $h = 0$. Es ist gut zugänglich für analytische und numerische Näherungsmethoden. Für $J > 0$ (ferromagnetisch) zeigt es folgendes Verhalten:

$T \ll T_c$: Bei tiefen Temperaturen sind fast alle Spins parallel ausgerichtet, da β groß wird und damit der Energieterm im Boltzmann-Gewicht wichtig wird.

$T \gg T_c$: Bei hohen Temperaturen ist das System ungeordnet. (Entropie/Anzahl möglicher Zustände dominiert)

$T \approx T_c$: Geht die Temperatur gegen die kritische Temperatur wächst die Korrelationslänge ξ , bei $T = T_c$ ist $\xi = \infty$. Man findet Regionen gleicher Spins auf allen Längenskalen, das System ist selbstähnlich.

Bsp: Erreicht eine Flüssigkeit die kritische Temperatur T_c so bilden sich ebenfalls Fluktuationen (der Dichte) auf allen Längenskalen. Wenn $\xi \approx \lambda_{\text{Licht}}$ wird Licht gestreut und die Flüssigkeit wird milchig: Kritische Opaleszenz

Def M: s.S. 12

2 Die Zustandssumme und ihre Ableitungen, Kritische Exponenten

Wir betrachten ein System mit den Zuständen $\{\alpha\}$, diese dürfen diskret oder kontinuierlich sein (Notation im Folgenden diskret).

Bsp: Spins $\{s_i\}$, Atome $\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}$

Die Erkenntnis aus der Thermodynamik ist, dass die Wahrscheinlichkeit für α gleich der Boltzmann-Wahrscheinlichkeit ist.

Die Wahrscheinlichkeit für einen Zustand α ist:

$$p_\alpha = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\alpha} \quad (2.1)$$

mit dem Boltzmanngewicht $\beta = \frac{1}{k_B T}$ und der Zustandssumme:

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_\alpha} \quad (2.2)$$

2.1 Thermodynamische Erwartungswerte

Hier werden aus der Zustandssumme berechenbare Erwartungswerte betrachtet.

$$\langle X \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} X_{\alpha} = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} X_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}$$

2.1.1 Zustandssumme

Die Zustandssumme ist quantenmechanisch definiert als

$$Z = \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}}) = \sum_i \langle \psi_i | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_i \rangle = \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta \hat{H}} | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} \quad (2.3)$$

wobei α die Eigenbasis von \hat{H} ist.

Die klassische statistische Physik ergibt sich wenn die Eigenbasis aus Produktzuständen besteht, z.B.:

$$|\alpha\rangle = |s_1, s_2, s_3, \dots\rangle = |s_1\rangle |s_2\rangle |s_3\rangle \dots \quad (2.4)$$

von lokalen Größen

Der größte Teil dieser Vorlesung wird sich mit klassischen Effekten beschäftigen

(QM Heisenberg-Modell s.S.19)

2.1.2 Beispiel: Innere Energie

Die Innere Energie U ist der Erwartungswert der Energie und kann über einfache Ableitung der Zustandssumme dargestellt werden:

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} E_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} = - \frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} \quad (2.5)$$

2.1.3 Beispiel: Freie Energie

Die freie Energie F ist definiert über

$$Z = e^{-\beta F} \Leftrightarrow F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (2.6)$$

In dieser Vorlesung werden der Einfachheit halber alle freien Energien mit F bezeichnet (siehe Kap. 2.2) . der Zusammenhang mit der Inneren Energie ist

$$F = U - TS \quad (\text{Übung!}) \quad (2.7)$$

mit der Entropie:

$$S = -k_B \sum_{\alpha} p_{\alpha} \ln(p_{\alpha}) \quad (2.8)$$

2.1.4 Beispiel: Spezifische Wärme

Auch die spezifische Wärme kann über zweifache Ableitung der Zustandssumme beschrieben werden.

$$c_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = k_B \beta^2 \left. \frac{\partial^2 \ln(Z)}{\partial \beta^2} \right|_V \quad (2.9)$$

2.2 Äußere Felder

Diese entsprechen Nebenbedingungen, z.B. Volumen.

Die Ankopplung erfolgt über $H_0 \rightarrow H = H_0 - \sum_i p_i V_i$

Einige Beispiele:

(Parameter)	Nebenbedingung	V_i	Typischer Beitrag zu H
	Volumen	V	$-pV$
	magnetisches Feld	h	$-Mh, \quad M = \sum_i M_i \sim \sum_i s_i$
	chemisches Potential	μ	$-N\mu$

Die Zustandssumme wird dann zu $Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta(H_0 - \sum_i p_i V_i)} =: e^{-\beta F}$

und der Erwartungswert einzelner Größen kann folgend berechnet werden

$$\langle p_i \rangle = -\frac{\partial F}{\partial V_i} \quad \langle n \rangle = -\frac{\partial F}{\partial h} \quad (2.10) \quad \ddot{u}$$

Vorsicht:

- Die V_i sind von außen vorgegebene Nebenbedingungen (Volumen, Magnetfeld, chem. Potential ...)
- Die p_i sind resultierende Eigenschaften des Systems (Druck, Magnetisierung, Teilchenzahl)

z.B.: $\langle M \rangle = -\frac{\partial F}{\partial h}$. Dies ist ein Erwartungswert. Das statistische Ensemble umfasst Konfigurationen mit vielen Boltzmann-verteilten Werten von M.

$P_i, \quad M_i, \quad N_i$

$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha} + \beta P_{\alpha} V} \Rightarrow \frac{\partial \ln Z}{\partial V} = \beta \langle p \rangle$ s.r. aber $\frac{\partial \ln Z}{\partial p} = \frac{1}{\beta} V e^{-\beta E_{\alpha} + \beta P V}$ (nicht sehr nützlich)

und $\frac{\partial \ln Z}{\partial \langle p \rangle} = \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial \langle p \rangle} = \frac{11}{76} \beta \langle p \rangle \left(\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial V} \right)^{-1} = \frac{\langle p \rangle}{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ (nicht etwa "V")

(alpha hier für Systemzustand, auch bei p_alpha)

(+ weitere Abhäng.)

2.2.1 Linear Response

Auch wenn ein V_i nicht in H vorkommt, kann man $\langle p_i \rangle$ bestimmen indem man $-p_i V_i$ von Hand hinzufügt und $\langle p_i \rangle = - \frac{\partial F}{\partial V_i} \Big|_{V_i=0}$ berechnet.

2.3 Fluktuationen

2.3.1 Fluktuationen der Inneren Energie

$$(\delta U)^2 = \overbrace{\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle}^{\geq 0} = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{\partial^2 \ln(Z)}{\partial \beta^2}$$

$$= \frac{c_V}{k_B \beta^2} N$$

"N"

"extensiv"

\ddot{u}
(Nenner $1/Z$ auch ableiten!)

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial T}$$

Die letzte Relation gilt nicht in der Nähe eines kontinuierlichen Phasenübergangs.

Wenn $(\delta U)^2 \sim N$ gilt, dann ist $\delta U \sim \sqrt{N} \Rightarrow \frac{\delta U}{U} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$, relative Fluktuationen nehmen also wie $\frac{1}{\sqrt{N}}$ ab (außer in der Nähe eines kontinuierlichen Phasenübergangs).

N.B.

Achtung: Remanente Magnetisierung

$$M_0 = \lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle M \rangle / N$$

"Spontane" Sym.-brechung SSB (2.11)

Einfacher: Korrelationsfunktion $\langle s_i s_{i+r} \rangle$, $r \rightarrow$ unendlich, s.S.79

tritt erst auf, wenn unendlich große Systeme betrachtet werden, wobei $\langle M \rangle$ im Gleichgewicht sein muss. Solche Systeme existieren bei makroskopischen Systemen aber nicht. Für eine realistische Beschreibung fehlt die Zeit (Historie des Systems, sehr große Zeitskalen).

2.3.2 Für allgemeine Größen p_i

Analoges Vorgehen für allgemeine $\langle p_i \rangle = - \frac{\partial F}{\partial V_i}$

$$0 \leq \langle p_i^2 \rangle - \langle p_i \rangle^2 = - \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F}{\partial V_i^2} \quad (2.12)$$

Bsp: Suszeptibilität $\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} = - \frac{\partial^2 F}{\partial h^2} = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$

Vorsicht: z.B. Supraleitung $\langle \psi_i \psi_{i+r} \rangle$ ungleich Null ("Symm.brechung") ??
Das ist eine Mean Field Betrachtung. In Wirklichkeit unmöglich weil sonst Verletzung der Teilchenzahlerhaltung!
Tatsächlich relevant: Korrelation $\langle \psi_i \psi_{i+r} \rangle$
(Es reicht noch weniger: endliche "Stiffness", "supraleitende Dichte", s.a. S.79)

2.4 Korrelationsfunktionen

Beispiel: System von Spins $s_i \in \{-1, +1\}$ auf Gitterplätzen/Orten i

Def.: Korrelationsfunktion

$$G(i, j) = \langle s_i s_j \rangle \quad (2.13)$$

z.B. Ising-Modell bei T=0

2.4.1 Ohne Wechselwirkung

Der Grenzfall von nicht wechselwirkenden Spins beschreibt einen Paramagneten. Für die Korrelationsfunktion ergibt sich:

$$G(i, j) = \langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_i s_j e^{-\beta H} = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_i s_j e^{+\beta \mu h \sum_i s_i}$$

$$= \frac{1}{Z} \left(\sum_{s_i} s_i e^{+\beta \mu h s_i} \right) \left(\sum_{s_j} s_j e^{+\beta \mu h s_j} \right) \prod_{k \neq i, j} \left(\sum_{s_k} e^{+\beta \mu h s_k} \right)$$

Da keine Wechselwirkung besteht, lässt sich die Mehrfachsumme über alle möglichen Spin-konfigurationen $\{s_i\}$ in Produkte von Summen über die einzelnen Spins s_i zerlegen, wie in der zweiten Zeile zu sehen ist.

Mit $Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta \mu h \sum_i s_i}$ und dem Kürzen von Faktoren zu $k \neq i, j$ erhält man schließlich:

$$G(i, j) = \langle s_i s_j \rangle = \frac{\sum_{s_i} s_i e^{+\beta \mu h s_i}}{\sum_{s_i} e^{+\beta \mu h s_i}} \cdot \frac{\sum_{s_j} s_j e^{+\beta \mu h s_j}}{\sum_{s_j} e^{+\beta \mu h s_j}} = \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (2.14)$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass man den Erwartungswert $\langle s_i \rangle$ schreiben kann als:

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_i e^{-\beta H} = \frac{\left(\sum_{s_i} s_i e^{+\beta \mu h s_i} \right) \prod_{k \neq i} \left(\sum_{s_k} e^{+\beta \mu h s_k} \right)}{\prod_{k'} \left(\sum_{s_{k'}} e^{+\beta \mu h s_{k'}} \right)} = \frac{\sum_{s_i} s_i e^{+\beta \mu h s_i}}{\sum_{s_i} e^{+\beta \mu h s_i}} \quad (2.15)$$

Strom (beta mu h)

beta mu h = (Energie mu h) / (Energie k_B T)

~~2.4.2 Mit Wechselwirkung~~

Bei der Beschreibung von wechselwirkenden Spins ist es nützlich, die verbundene Korrelationsfunktion (connected correlation function) zu verwenden:

$$G_c(i, j) := \underbrace{\langle s_i s_j \rangle}_{G(i, j)} - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \langle (s_i - \langle s_i \rangle) (s_j - \langle s_j \rangle) \rangle \quad (2.16)$$

(wichtig bei h=0: gemeint ist die Subtraktion der Magnetisierungen, definiert in (2.11))

Dies entspricht formal der Kovarianz $Cov(X, Y)$ zweier statistischer Größen X und Y. Für den wechselwirkungsfreien Fall verschwindet $G_c(i, j)$. (2.14)

Typischerweise verhält sich $G_c(i, j)$ wie in Abbildung 2.1: Für $T > T_c$ verschwinden die Magnetisierungen: $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = 0$ und $G_c(i, j)$ geht in die einfache Korrelationsfunktion $G(i, j)$ über.

$G_c(r)$, die verbundene Korrelationsfunktion für zwei Spins im Abstand r zueinander, verhält sich für großes r wie

$$G_c(r) \propto \frac{e^{-\frac{r}{\xi}}}{r^\tau} \quad (2.17)$$

Mit ξ der Korrelationslänge und τ einem (weniger wichtigen) kritischen Exponenten. Für Temperaturen $T \neq T_c$ weist $G_c(r)$ somit ein exponentielles Verhalten auf, welches durch die Korrelationslänge bestimmt ist. Bei $T = T_c$ wird jedoch $\xi = \infty$ und $G_c(r)$ folgt einem Potenzgesetz:

$$G_c(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (2.18)$$

mit d der räumlichen Dimension und η einem kritischen Exponenten, welcher so definiert ist, dass sich in der Mean-Field-Theorie $\eta = 0$ ergibt. Der Term -2 folgt aus der Definition von η .

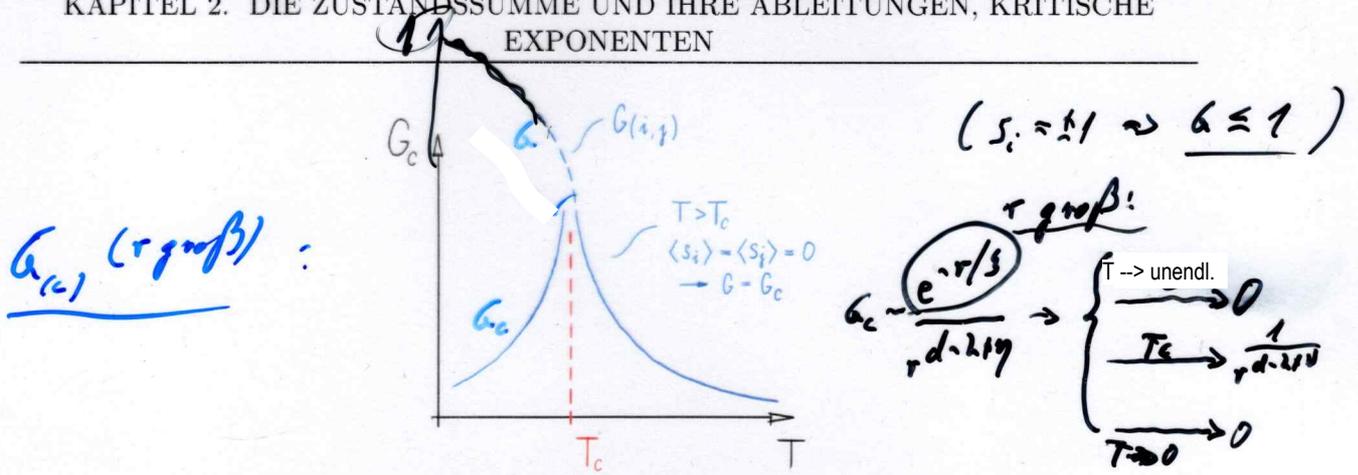


Abbildung 2.1: Typisches Verhalten der verbundenen Korrelationsfunktion $G_c(i,j)$ bei verschwindendem Magnetfeld ($h = 0$). und bei großen Abständen r

2.4.3 Allgemeiner Zugang

Man führt äußere, ortsabhängige "Quellen" J_i ein, indem man den Hamilton H ersetzt durch:

$$H \rightarrow H - \frac{1}{\beta} \sum_i J_i s_i \quad \text{Bessere Schreibweise wäre } h_i \text{ statt } J_i \quad (2.19)$$

wobei die Summe über alle Plätze i läuft. Dies ist ähnlich zum Term $-h \sum_i s_i$ beim Paramagneten. Dadurch gilt:

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial J_i} \quad \langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial J_i \partial J_j} \quad (2.20)$$

Falls es sich bei den Quellen J_i um künstlich eingeführte Hilfsgrößen handelt (im Unterschied zu im System real auftretenden Feldern etc.) muss deren Einfluss am Ende wieder entfernt werden, indem man obige Ausdrücke bei $\{J_i\} = 0$ auswertet. Gleiches gilt auch für den allgemeinen Fall der n-Punkt Korrelationsfunktion:

$$G^{(n)}(i_1, \dots, i_n) \equiv \langle s_{i_1} \dots s_{i_n} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^n Z}{\partial J_{i_1} \dots \partial J_{i_n}} \quad (2.21)$$

und der verbundenen Korrelationsfunktion:

$$G_c^{(2)}(i,j) \equiv \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial J_i \partial J_j} \quad (2.22) \quad ! \quad (\ddot{u})$$

2.5 Kritische Exponenten

Kritische Exponenten beschreiben das Verhalten des Systems nahe eines (kontinuierlichen) Phasenübergangs, d.h. für $T \rightarrow T_c$. Beispiele für solch ein kritisches Verhalten sind in Kapitel 1.1 gezeigt. Im Rahmen dieser Betrachtung macht es Sinn, eine

Reduzierte Temperatur: $t_* = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.23)$

zu definieren.

2.5.1 Allgemeine Definition eines kritischen Exponenten λ

Für eine betrachtete Funktion $f(t)$ mit der reduzierten Temperatur $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ gilt in der Nähe der kritischen Temperatur T_c :

$$f(t) \propto |t|^\lambda, \text{ für } t \rightarrow 0 \quad (2.24)$$

(hier ist schon ein Resultat der Renormierungsgruppe vorweggenommen: gleiche Exponenten für $t > 0$ und $t < 0$, außer f. Ordnungspar.)

Eine genauere Betrachtung erhält man über eine Potenzreihenentwicklung:

$$f(t) \propto \underbrace{|t|^\lambda}_{\text{niedrigste Potenz}} (1 + \overbrace{bt^{\lambda_1} + \dots}^{\text{Korrekturen (fallen schneller ab)}}) \quad \lambda_1, \dots > 0 \quad (2.25)$$

Für $t \rightarrow 0$ dominiert die niedrigste Potenz das Verhalten von f , λ ist daher gleich dem kleinsten Exponenten in der Potenzreihe $|t|^x$.

Eine äquivalente Definition von λ lautet:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\ln |f(t)|}{\ln t} \quad \text{oder} \quad \lambda = \lim_{t \rightarrow 0^-} \frac{\ln |f(t)|}{\ln(-t)} \quad (2.26)$$

Achtung: Je nachdem, ob der linksseitige oder der rechtsseitige Limes gebildet wird, erhält man i.A. unterschiedliche Werte für λ . Ein physikalisches Beispiel hierfür ist die remanente Magnetisierung M_0 , welche für $t \rightarrow 0^+$ konstant ($\lambda = 0$) Null ist, für $t \rightarrow 0^-$ jedoch ein $\lambda \neq 0$ aufweist (Siehe Abbildung 1.4)

Beispiele:

$$f(t) = At^{\frac{1}{2}} + Bt^{\frac{1}{4}} + Ct \rightarrow \lambda = 1/4$$

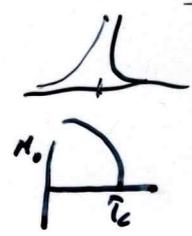
$$f(t) = At^2 e^{-t} = At^2(1 - t + t^2 - \dots) \rightarrow \lambda = 2$$

$$f(t) = At^2 e^{1/t} \text{ nicht in Potenzreihe entwickelbar und } \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\ln |f(t)|}{\ln t} \text{ existiert nicht.} \rightarrow \lambda \text{ nicht definiert!}$$

Aber ansonsten: Universalfunktionsformel $\lambda_- \approx \lambda_+$!

Tabelle 2.1: Die kritischen Exponenten im Überblick

Krit. Exp.	Physikalische Größe	Magn. System (T,h)	Flüssiges System (p, V)
$\alpha > 0$	<u>Spezifische Wärme</u>	$c_h \propto t ^{-\alpha}$ $h_c = 0$	$c_V \propto t ^{-\alpha}$ V_c
$\beta > 0$	<u>Ordnungsparameter</u>	$M_0 \propto (-t)^\beta$ $t < 0 \wedge h = h_c = 0$	$\rho_g - \rho_l \propto (-t)^\beta$ (Dichtedifferenz)
$\gamma > 0$	<u>Suszeptibilität</u>	$\chi \propto t ^{-\gamma}$	$\kappa_T \propto t ^{-\gamma}$ (<u>Isotherme Kompressibilität</u>)
δ	<u>Krit. Isotherme ($t = 0$)</u>	$h \propto M ^\delta \cdot \text{sign}(M)$	$p - p_c \propto \rho_g - \rho_l ^\delta \cdot \text{sign}(\rho_g - \rho_l)$
ν	<u>Korrelationslänge</u>	$\xi \propto t ^{-\nu}$	$\xi \propto t ^{-\nu}$
η	<u>Korr.funktion bei T_c</u>	$G_c \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$	(dto)



-> Abb 5.10

Exakt

2.5.2 Ungleichungen für die kritischen Exponenten

Aus der Thermodynamik (aus den Definitionen) folgen Ungleichungen zwischen den kritischen Exponenten.

$$c_\mu > 0 \text{ und } \chi_T \cdot (c_h - c_\mu) = T \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_h^2 \quad (2.27)$$

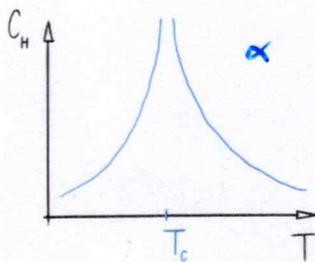
$\Rightarrow \dots \Rightarrow$

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad \text{Skalenrelationen} \quad (2.28)$$

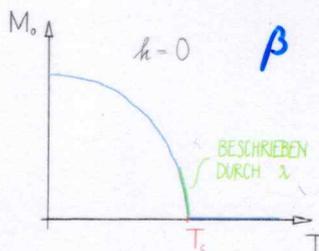
$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad = \text{Scaling relations} \quad (2.29)$$

(Hyperscaling)

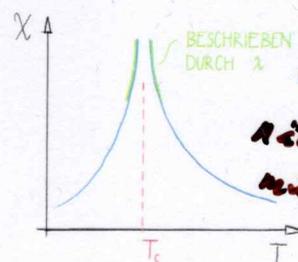
Beide Ungleichungen stimmen exakt. Zwei weitere Ungleichungen kommen unter "plausiblen Annahmen hinzu. Im Experiment sind diese Ungleichungen als Gleichungen erfüllt. Dies lässt sich mit Hilfe der Renormierungsgruppe zeigen (siehe Kapitel: 8).



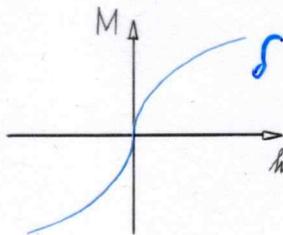
Spezifische Wärme



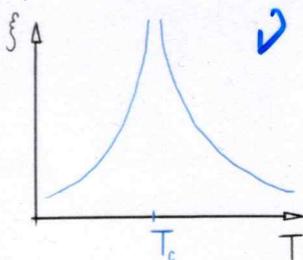
Ordnungsparameter



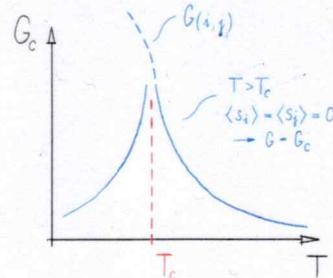
Suszeptibilität



Kritische Isotherme



Korrelationslänge



Korrelationsfunktion

!
 -> nur 2 unabh. krit. Exp.
 -> 2 Größen n im (T, h) müssen eingestellt werden
 bei T_c ?
 bei T_c ?
 bei T_c ?

Abbildung 2.2: Die kritischen Exponenten im Überblick

2.6 Zur Renormierungsgruppe

Wir betrachten das Verhalten von Systemen unter Änderung der Längenskala am Beispiel des zweidimensionalen Ising-Modells. Blöcke von 3 x 3 Plätzen werden zu je einem effektiven Spin zusammengefasst, welche je nach Mehrheit der 9 einzelnen Plätze wieder einen Spin von ±1 aufweisen. Damit verändert sich die Systemgröße von L x L auf L/3 x L/3, bei unendlich großem System geht diese Rechnung aber nicht auf. Wenn man diese Blocktransformation iteriert, lassen sich je nach Temperatur unterschiedliche Phänomene beobachten.

- T < T_c: Endlich große Gebiete schrumpfen mit jeder weiteren Transformation und Fluktuationen werden kleiner. Durch Iteration erhalten wir ein geordnetes System wie bei T = 0.

KAPITEL 2. DIE ZUSTANDSSUMME UND IHRE ABLEITUNGEN, KRITISCHE EXPONENTEN

- $T > T_c$: Kurzreichweitige Ordnung wird mit jeder Iteration zerstört. Man erhält ein ungeordnetes System wie bei $T = \infty$.
- $T = T_c$: Man beobachtet Fluktuationen auf allen Längenskalen mit dem Potenzgesetz der Korrelationsfunktion G in Abhängigkeit vom Ort r , der Dimension des Systems d und dem kritischen Exponenten η

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d+\eta-2}}$$

Die Korrelationslänge $\xi = \infty$ bleibt von der Blocktransformation unberührt, man sagt das System ist selbstähnlich.

Potenzgesetz: Skaleninvariant! $\left(\frac{r}{r_0}\right)^x \sim \left(\frac{r}{r_0}\right)^x$

Dagegen: $e^{-r/\xi} \neq e^{-r/\xi'}$

$$\rightarrow f(r) := \left(\frac{r}{r_0}\right)^x \Rightarrow \frac{f(r_1)}{f(r_2)} = \frac{f(\lambda r_1)}{f(\lambda r_2)}$$

Analoges Verhalten NICHT bei exp-Funktion