4 Finite Size Scaling (FSS)

- Physikalische Betrachtungen unabhängig vom numerischen Verfahren
- Phasenübergänge mit Singularitäten (d.h. Singularität in einer Ableitung der Zustandssumme Z) treten ~~auf. Diese sind jedoch nur~~ im unendlich großen System auf.
- Wie verhält sich ein physikalisches System bei großem L und $L \to \infty$?
  - Auch für die Auswertung von Rechnungen bei endlichem L
  - Enthält Informationen über kritische Exponenten
- Verwandte Frage: Reale Systeme sind endlich groß → Wieso beobachtet man Phasenübergänge?

4.1 Systeme der Größe L^d

$L < \infty$

Diese d-dimensionalen Systeme mit dem Volumen $V = L^d$ sind in allen Richtungen ~~gleich~~ groß.

allg.: in alle Richtungen: $\sim L$

4.1.1 Suszeptibilität pro Platz

Für $h = 0$ ~~oder $T > T_c$~~ ergibt sich:

transl. inv.

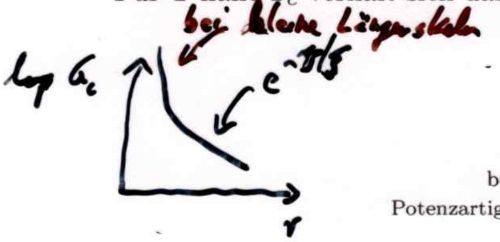
$$\frac{\chi}{V} = \frac{\beta}{V}(\langle M^2\rangle - \underbrace{\langle M\rangle^2}_{=0 \text{ für } h=0}) = \frac{\beta}{V}\langle\Big(\sum_i s_i\Big)\Big(\sum_j s_j\Big)\rangle = \beta\langle s_{i_0}\sum_j s_j\rangle \tag{4.1}$$

$$= \beta\sum_j \underbrace{\langle s_{i_0} s_j\rangle}_{\substack{\text{hängt nur vom}\\ \text{Abstand } i_0-j \text{ ab}}} \propto \beta\sum_r G(r)\underbrace{r^{d-1}}_{\text{Anzahl der Spins im Abstand r}} \cdot \int d\Omega \tag{4.2}$$

Kritisches Verhalten

$\xi >> 1$

Für T nahe T_c verhält sich das System wie folgt:



$$\chi \propto |t|^{-\gamma} \quad \text{mit} \quad t = \frac{T - T_c}{T_c} \tag{4.3}$$

$$\underbrace{G(r) \propto e^{-r/\xi}}_{\substack{\text{bei großen Abständen} \frac{r}{\xi} \gg 1\\ \text{Potenzartiges Verhalten in r hier nicht wichtig}}} \quad ; \quad \xi \propto |t|^{-\nu} \tag{4.4}$$

$\int e^{-r/\xi}\, dr \approx \xi$

FSS – **Annahme:** Bei genügend großen Abständen r sind ξ und L die einzig wichtigen Längenskalen. D.h. die nächst kleinere physikalische Längenskala ist um einen endlichen Betrag kleiner als ξ. Mit ξ ist dabei immer die Korrelationslänge im unendlich großen System gemeint ($\xi = \xi_\infty$).

!!

einer dimensionslosen Größe

Deswegen kann die Suszeptibilität nur von $\frac{\xi}{L}$ abhängen. Andere Größen können auch Abhängigkeiten von $\frac{r}{\xi}$ oder $\frac{r}{L}$ aufweisen. Für χ als Funktion von Systemlänge L und Temperatur T kann man demnach ansetzen:

$$\frac{\chi}{V}(L,T) = |t|^{-\gamma} g\left(\frac{L}{\xi}\right) \tag{4.5}$$

mit $g(x)$ einer noch unbekannten Funktion.

Grenzfälle

1. unendlich großes System: $L \to \infty \;\to\; x = L/\xi \to \infty$

$$\frac{\chi}{V}(L \to \infty, T) \propto |t|^{-\gamma} \quad \to \quad g(x) \underset{x\to\infty}{\longrightarrow} const \tag{4.6}$$

d.h. $x \ll 1$

2. Für $1 \ll L \ll \xi$, sind alle Spins (fast perfekt) korreliert, da $L \ll \xi$. Die Suszeptibilität χ ist dann ~~(für nicht zu hohes T)~~ im Wesentlichen unabhängig von der Temperatur. Mit $x = \frac{L}{\xi} \ll 1$ und $x \propto |t|^{\nu}$, da $\xi \propto |t|^{-\nu}$, gilt somit:

$x \sim |t|^{\nu}$

$|t| \sim x^{\frac{1}{\nu}}$

$$\frac{\chi}{V} = \underbrace{const}_{\text{mit Bezug auf T}} \overset{!}{=} |t|^{-\gamma} g\left(\frac{L}{\xi}\right) \implies g(x) \underset{x\ll 1}{\longrightarrow} \propto x^{\frac{\gamma}{\nu}} \sim |t|^{\gamma} \tag{4.7}$$

~~Kombiniert man die aus den beiden Grenzfällen gewonnene Information über $g(x)$ erhält man:~~

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\chi}{V} \underset{L\ll\xi}{\longrightarrow} \propto |t|^{-\gamma}\left(\frac{L}{a|t|^{-\nu}}\right)^{\frac{\gamma}{\nu}} = \left(\frac{L}{a}\right)^{\frac{\gamma}{\nu}}} \tag{4.8}$$

L-Abhängigkeit von χ bei $L \ll \xi$!

unabhängig von der Temperatur T. Die Gitterkonstante a stellt sicher, dass x dimensionslos bleibt. Obiger Zusammenhang gilt auch für das Maximum der Suszeptibilität χ_{max}. ⇒ bestimme $\frac{\chi}{V}$!

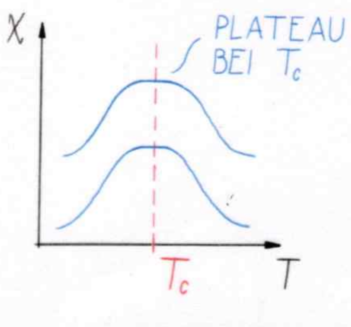


Abbildung 4.1: Veranschaulichung des Bereichs um T_c, in dem χ (näherungsweise) konstant ist.

4.1.2 Spezifische Wärme

Analog zur Betrachtung für die spezifische Wärme zu (4.5) schreibt man ~~findet man:~~

$$C(L,t) = |t|^{-\alpha} f\left(\frac{L}{\xi(t)}\right) \tag{4.9}$$

und kann wieder ähnlich vorgehen.

Man kann aber auch gleich allgemein beliebige kritische Observable betrachten:

4.1.3 Allgemein

Gegeben sei eine Observable $Q(L,T)$ mit kritischem Verhalten $\propto |t|^y$. Man findet:

$$Q(L,T) \equiv Q(L,|t|) = |t|^y f_1\left(\frac{L}{\xi(t)}\right) = |t|^y f_2\left(\frac{L}{a|t|^{-\nu}}\right) = |t|^y f_3\left(L^{1/\nu}|t|\right)$$

mit geeigneten Funktionen f_1, f_2, f_3

$$\Rightarrow L^{y/\nu} Q(L,|t|) = \left(L^{1/\nu}|t|\right)^y f_3\left(L^{1/\nu}|t|\right) \quad \sim \xi \gg 1$$

$$\boxed{L^{y/\nu} Q(L,|t|) = f\left(L^{1/\nu}|t|\right)} \tag{4.10}$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass sich die Temperaturabhängigkeit von Q mithilfe der Renormierungsgruppe (siehe Kapitel 8) auf eine Abhängigkeit von $|t|$ zurückführen lässt.

Sonst getrennt $t>0$, $t<0$

Plottet man nun $L^{y/\nu}Q(L,|t|)$ gegen die "Skalenvariable" $s = L^{1/\nu}|t|$, erhält man die "Skalenfunktion" $f(s)$ für alle genügend großen L. Dies lässt sich für die Bestimmung von ν, γ und T_c nützen und bildet den Ausgangspunkt für das sogenannte Finite-Size-Scaling:

Finite Size Scaling(FSS): Bestimme die Exponenten ν, γ und die kritische Temperatur T_c so, dass die Daten zur Observablen $Q(L,|t|)$ für verschiedene (genügend große) L auf eine gemeinsame Kurve $f(s)$ fallen.

Wenn dies möglich ist, dann Skalenannahme à posteriori gerechtfertigt.

gefolgt von

FSS ist sehr viel besser als ein sequentielles Vorgehen, wie etwa die Extrapolation der Daten zu $L \to \infty$, ein Fit für den kritischen Exponenten oder Fit von T_c.

!

4.2 Systeme der Größe $(\infty^{d-1}) \cdot L$

: "Dimensional crossover"

Kein direkter Zusammenhang mit FSS

Hier werden d-dimensionale Systeme betrachtet, die in einer Dimension auf die Länge L beschränkt und in den restlichen (d-1) Dimensionen unendlich groß sind. Beispiel ist eine unendlich ausgedehnte Scheibe der Dicke L. Folgende Fälle werden unterschieden:

1. ξ klein $\Rightarrow$ kein kritisches Verhalten
2. $1 \ll \xi \ll L$ $\Rightarrow$ kritisches Verhalten des d-dimensionalen Systems $\to$ kritische Exponenten. Das System "sieht" nicht, dass eine Dimension auf L beschränkt ist.
3. $L \ll \xi$ $\Rightarrow$ kritisches Verhalten des (d-1)-dimensionalen Systems

Zwischen 2. und 3. tritt sogenanntes „Crossover“ auf $\to$ physikalische Phänomene

4.2.1 Beispiele

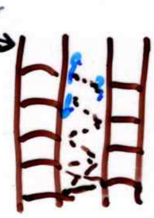
1. **Ising-Modell** $(\infty \times \infty \times L)$
2. **Hochtemperatur-Supraleiter** Weisen eine Schichtstruktur aus CuO-Ebenen auf. Bei Annäherung an T_c findet man experimentell (!) zunächst das 2-dimensionale Verhalten des XY-Modells und dann 3-d kritisches Verhalten mit 3-d Supraleitung.

   weil die Kopplung in der 3. Richtung klein ist und erst bei großen Xi wichtig

   !

   $T \approx 100K$

3. **Leiter-Materialien** Lassen sich durch (mehrere) Gitter mit Leiterstruktur beschreiben. Ein Gitterplatz kann dabei mit Plätzen in der selben Leiter und denen der anderen Leiter wechselwirken, was jeweils durch unterschiedliche Kopplungsstärken $(J_\perp, J_\parallel, J')$ beschrieben wird.



Hier: Dim. Crossover als Funktion der Temperatur

$1d \rightsquigarrow 2d \rightsquigarrow 3d$

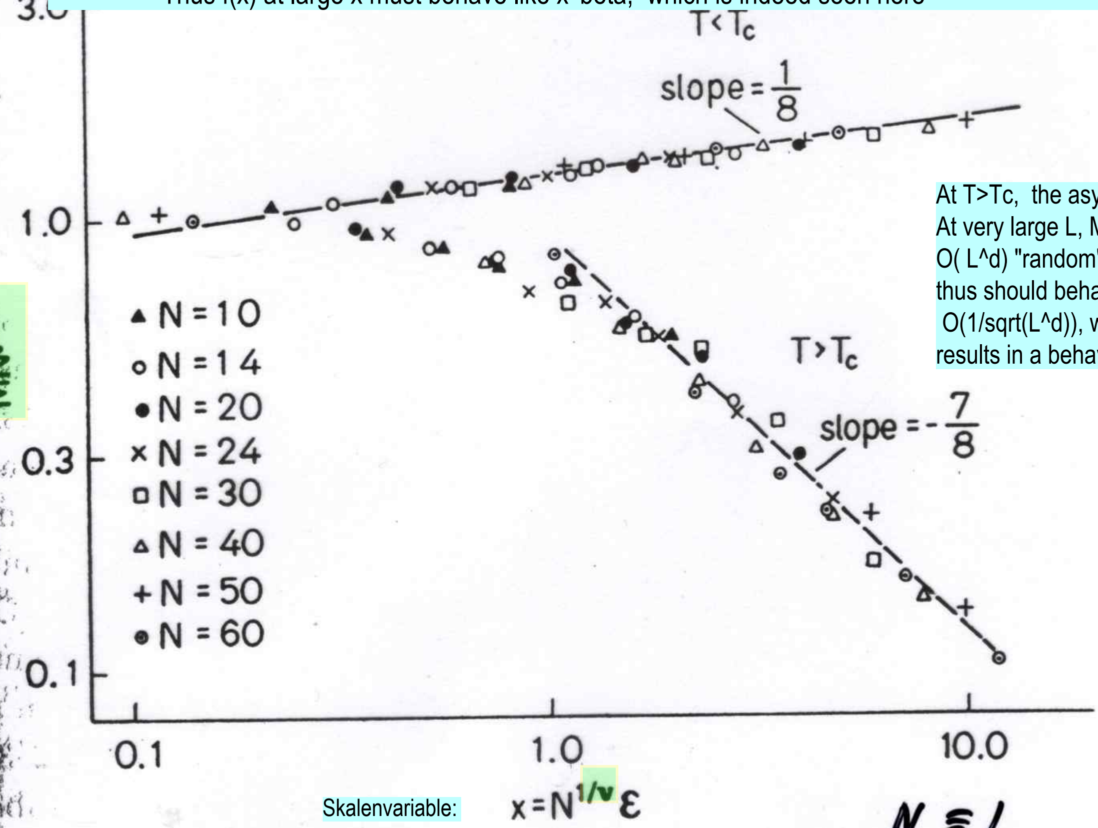
$T_{Neel} \approx 4K$

AF-Kopplungen
zwischen Leitern eff. sehr kleine Kopplung

From D. Landau, Phys. Rev. B13, 2997 (1976) (!)

"Order parameter M" is actually average of modulus of M: < / sum of spins/ >

At T<Tc: M L^(beta/nu) = f(L^(1/nu) t)
For very large L, one should get the asymptotic form: M sim t^beta (with beta=1/8 for 2d Ising)
Thus for fixed L: left side sim t^beta, then also f(... t) sim t^beta, thus for any large L, f(x) sim x^beta.
Thus f(x) at large x must behave like x^beta, which is indeed seen here



At T>Tc, the asymptotic M is zero.
At very large L, M is the average of
O(L^d) "random" numbers (from clusters),
thus should behave like the standard deviation,
O(1/sqrt(L^d)), which eventually....
results in a behavior x^(beta-d/2)

Skalenvariable:

$N \equiv L$

epsilon=reduced temp.
contains Tc

Figure 5.7: Plot of the scaled magnetization of two-dimensional Ising models for lattices of linear dimension N for several values of N both for $T > T_c$ and $T < T_c$ (taken from [35]).

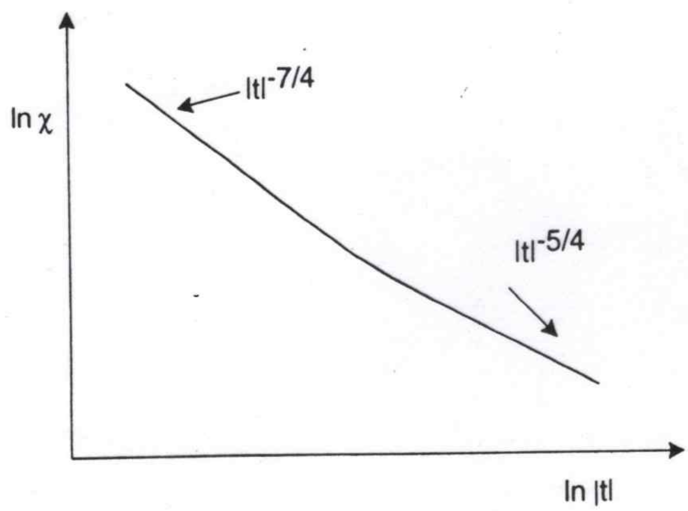


Figure 5.8: Illustration of crossover behavior in an Ising model in a slab geometry.

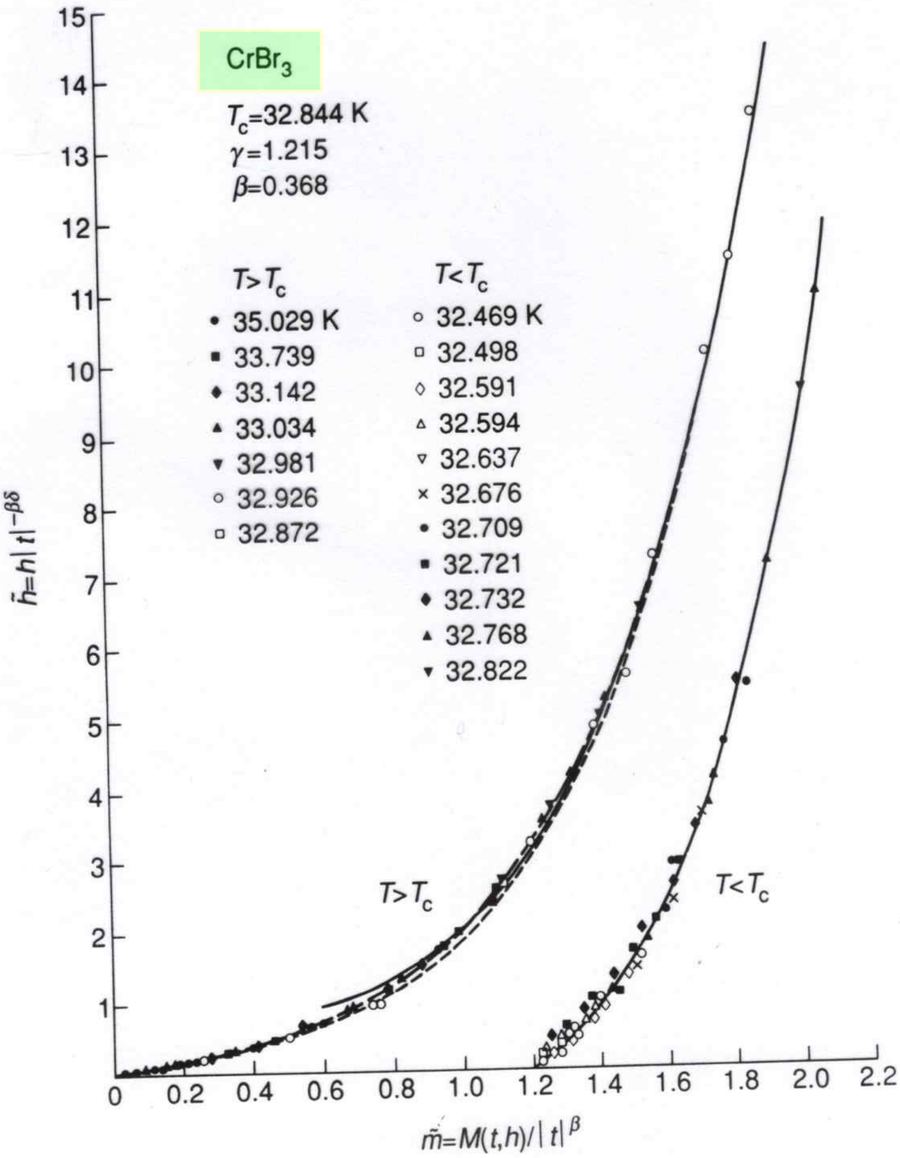


Fig. 8.5. Plot of scaled magnetic field versus scaled magnetization for the ferromagnet, $CrBr_3$. Note the collapse of the data on to two curves, one for temperatures greater and one for temperatures less than the critical temperature. After Ho, J. T. and Lister, J. D. (1969). *Physical Review Letters*, **22**, 603.