

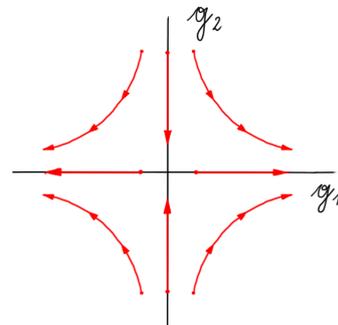
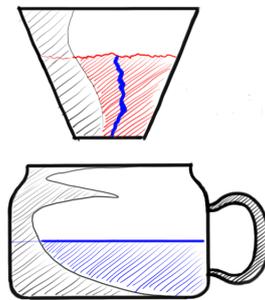
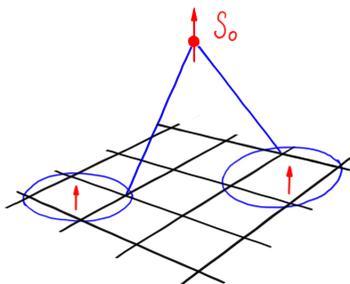
Phasenübergänge und kritische Phänomene

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	Perkolation	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 Perkolation	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

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 $T < T_c$:

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

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))

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (1.2)$$
$$c_V \propto \left(\frac{T_c}{T - T_c} \right)^\alpha$$

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

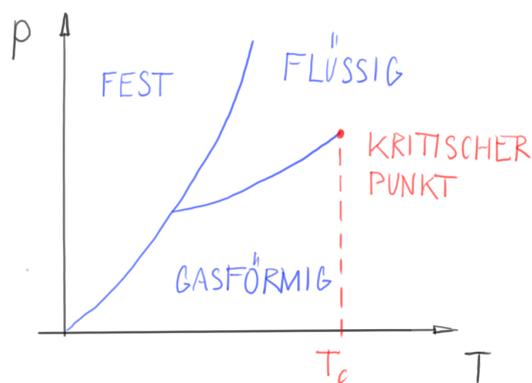


Abbildung 1.1: Phasendiagramm mit kritischem Punkt T_c, p_c

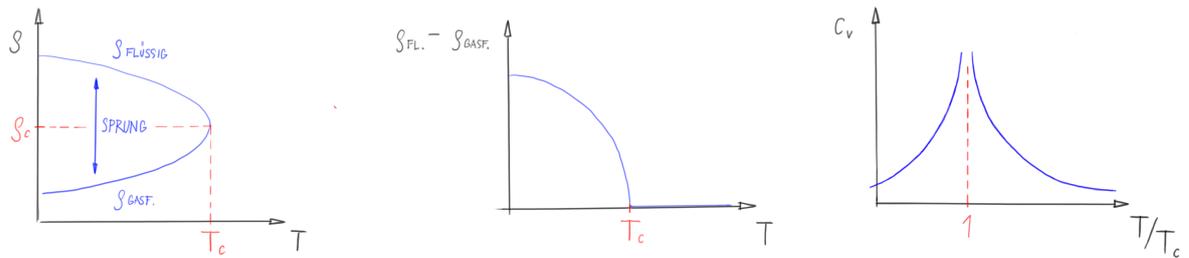


Abbildung 1.2: (a) Dichte über Temperatur. Für $T < T_c$ gibt es einen Sprung in der Dichte. (b) Selbe Information in der Darstellung als Ordnungsparameter $\rho_{fl} - \rho_{gas}$ (c) Singularität in der Wärmekapazität am Phasenübergang

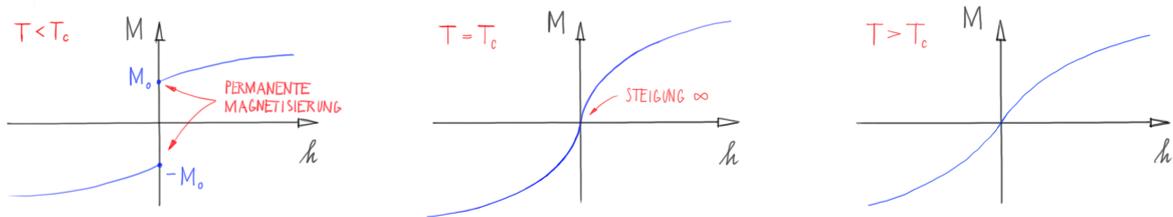


Abbildung 1.3: Magnetisierung M in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld h für ferromagnetisches System für Temperaturen $T < T_c$, $T = T_c$ und $T > T_c$.

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

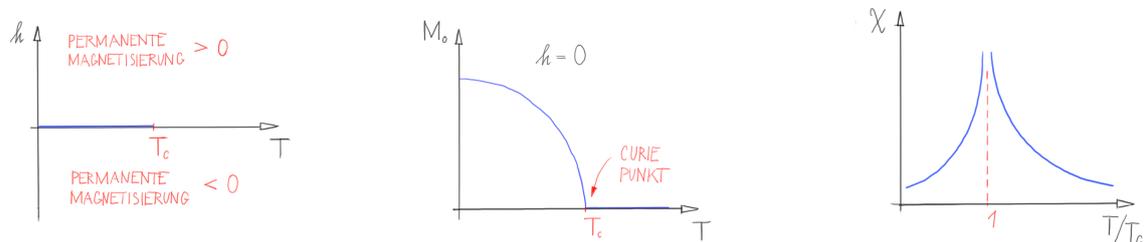


Abbildung 1.4: (a) Phasendiagramm des ferromagnetischen Systems, mit den beiden „Phasen“ $M_0 > 0$ und $M_0 < 0$. (b) Ordnungsparameter M_0 als Funktion der Temperatur. (c) Singularität in der Suszeptibilität χ als Funktion der Temperatur.

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

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

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).

1.2 Universalität

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

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

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.

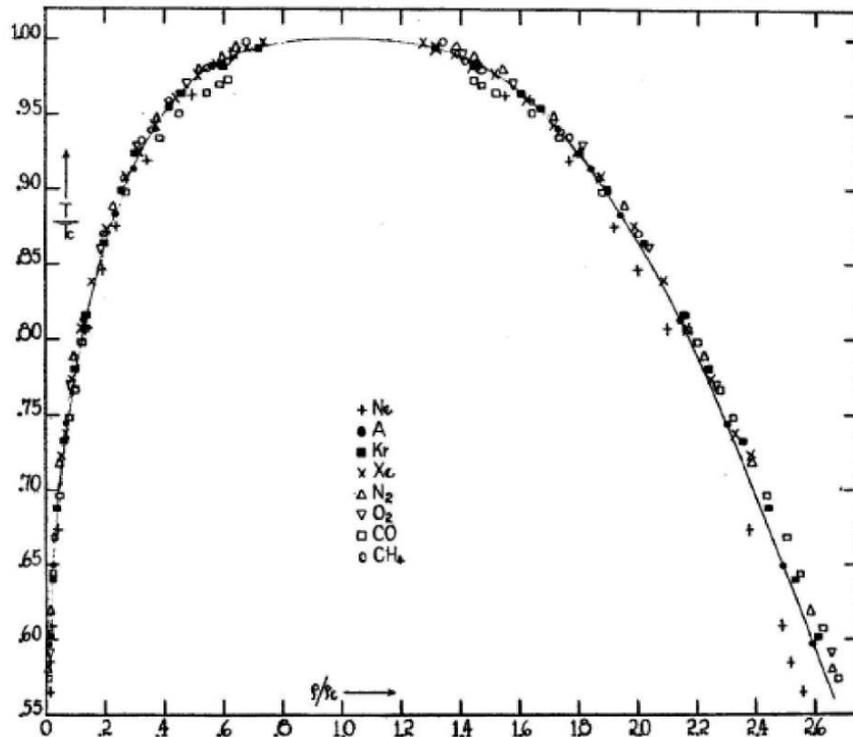


Abbildung 1.5: Skalierte Koexistenzkurven für verschiedene Gase. In diesem Beispiel stimmen die Kurven sogar weit weg vom kritischen Punkt sehr gut überein.

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.

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 $T = 0$)

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)

$T = T_c$: 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.

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

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.

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.:

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

Der größte Teil dieser Vorlesung wird sich mit klassischen Effekten beschäftigen

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

$$F = U - TS \quad (2.7)$$

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:

<u>Nebenbedingung</u>	<u>V_i</u>	<u>Typischer Beitrag zu H</u>
Volumen	V	$-pV$
magnetisches Feld	h	$-Mh,$ $M = \sum_i M_i \sim \sum_i s_i$
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

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

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 .

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 $\langle p_i \rangle = - \left. \frac{\partial F}{\partial V_i} \right|_{V_i=0}$ berechnet.

2.3 Fluktuationen

2.3.1 Fluktuationen der Inneren Energie

$$\begin{aligned} (\delta U)^2 &= \overbrace{\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle}^{\geq 0} = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \\ &= - \frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{\partial^2 \ln(Z)}{\partial \beta^2} \\ &= \frac{c_V}{k_B \beta^2} \stackrel{?}{\sim} N \end{aligned}$$

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

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

Achtung: Remanente Magnetisierung

$$M_0 = \lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle M \rangle \quad (2.11)$$

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

2.4 Korrelationsfunktionen

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

Def.: Korrelationsfunktion

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

2.4.1 Ohne Wechselwirkung

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

$$\begin{aligned} G(i, j) &= \langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_i s_j e^{-\beta H} = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_i s_j e^{-\beta \mu h \sum_i s_i} \\ &= \frac{1}{Z} \left(\sum_{s_i} s_i e^{-\beta \mu h s_i} \right) \left(\sum_{s_j} s_j e^{-\beta \mu h s_j} \right) \prod_{k \neq i, j} \left(\sum_{s_k} e^{-\beta \mu h s_k} \right) \end{aligned}$$

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 $Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta \mu h s_i}$ 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:

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

2.4.2 Mit Wechselwirkung

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

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

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

Typischerweise verhält sich $G_c(i, j)$ wie in Abbildung 2.1: Für $T > T_c$ verschwinden die Mittelwerte $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = 0$ 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 .

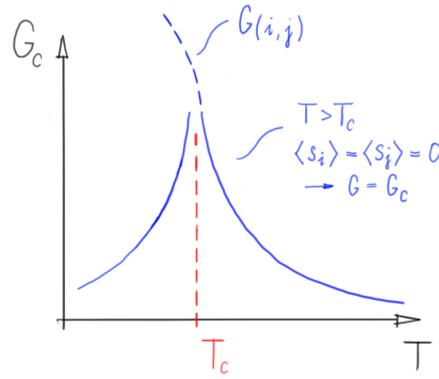


Abbildung 2.1: Typisches Verhalten der verbundenen Korrelationsfunktion $G_c(i, j)$ bei verschwindendem Magnetfeld ($h = 0$).

2.4.3 Allgemeiner Zugang

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

$$H \rightarrow H - \frac{1}{\beta} \sum_i J_i s_i \quad (2.19)$$

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**:

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

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 :

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

Eine genauere Betrachtung erhält man über eine Potenzreihenentwicklung:

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

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:

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

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

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

Tabelle 2.1: Die kritischen Exponenten im Überblick

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

2.5.2 Ungleichungen für die kritischen Exponenten

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

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

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (2.28)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (2.29)$$

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).

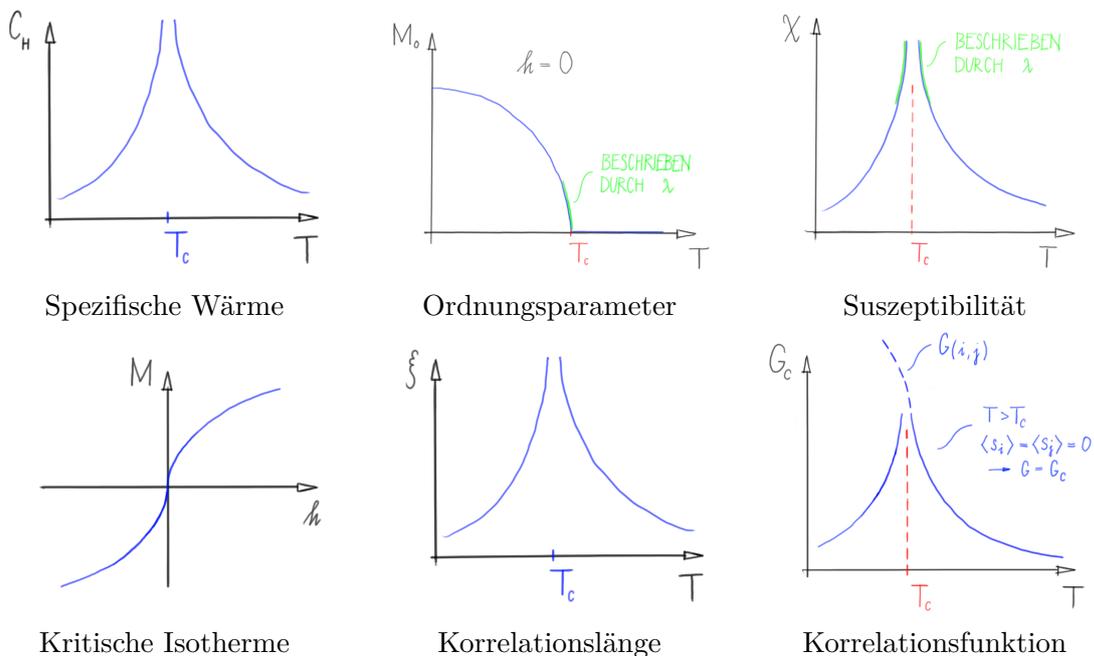


Abbildung 2.2: Die kritischen Exponenten im Überblick

2.6 Zur Renormierungsgruppe

Wir betrachten das Verhalten von Systemen unter Änderung der Längenskala am Beispiel des zweidimensionalen Ising-Modells. Blöcke von 3×3 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 $L \times L$ auf $\frac{L}{3} \times \frac{L}{3}$, 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 $T = 0$.

- $T > T_c$: 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.

3 Modelle und Darstellungen

3.1 Ising-Modell

Das Isingmodell ist eines der einfachsten Modelle. Es erlaubt, die Physik komplizierter realer Systeme zu verstehen (Universalität!). Das Modell beruht auf diskreten Variablen, welche die Spins auf einem Gitter repräsentieren und zwei Werte einnehmen können ($s_i \pm 1$). Als Gitter können folgende dienen:

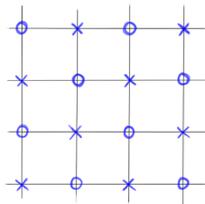
- 1D: Kette
- 2D: Quadratgitter, Dreiecksgitter, etc...

$$H(\{s_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$
$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H}$$

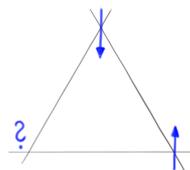
- $J > 0$: Ferromagnetische Kopplung \Rightarrow Tendenz zu FM ausgerichteten Spins (aber Einfluss durch Temperatur)
- $J < 0$: Antiferromagnetische Kopplung \Rightarrow Tendenz zu antiparallelen Spins.

Für $J < 0$ wichtige Unterscheidung

- **Bipartites Gitter**: Nächste Nachbarn gehören zu 2 verschiedenen Untergittern \Rightarrow AF Spinkonfiguration möglich (Neel-Konfiguration)



- **Nicht-Bipartites Gitter**: Zum Beispiel Dreiecksgitter



Wichtig: „Bipartit“ ist eine Eigenschaft der Kopplungsmatrix J_{ij} , nicht der geometrischen Position der Atome. Ein quadratisches Gitter mit übernächster-Nachbar-Kopplung ist *nicht* bipartit!

Relevante Observablen sind die Magnetisierung,

$$M = \frac{1}{N} \langle \mathcal{M} \rangle$$

$$\mathcal{M} = \sum_i s_i$$

Suszeptibilität,

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) = \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \ln Z$$

sowie die Korrelationsfunktion

$$G_{ij}^c = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

$$\chi = \frac{\beta}{N} \sum_{ij} G_{ij}^c$$

3.2 Realisierungen des Ising Modells

3.2.1 Magnetische Systeme

Schrittweise Vereinfachung von realen Materialien:

Reale Materialien \rightarrow Hubbard-Modell \rightarrow (bei Halbfüllung) Heisenberg-Modell

Spin $\frac{1}{2}$ Heisenbergmodell:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{xy} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J_z S_i^z S_j^z$$

Das Verhalten bei großen Abständen kann durch einfachere Modelle beschrieben werden (Universalität). Weitere Approximationen sind stark abhängig von J_{xy} und J_z :

- $J_z > J_{xy}$: Ising-Modell (= Heisenberg bei $J_{xy} = 0$)
- $J_z < J_{xy}$: XY-Modell (= Heisenberg bei $J_z = 0$)
- $J_z = J_{xy}$: Bleibt isotropes Heisenberg-Modell

Es ist dabei nicht notwendig, dass ein Term deutlich größer ist als der andere. Sobald eine Kopplung (auch nur minimal) schwächer ist als die andere, kann sie für große Abstände vollständig vernachlässigt werden.

3.2.2 Binäre Systeme

Ein Beispiel hierfür ist β -Messing (β -brass). β -Messing hat ein BCC-Gitter mit Cu und Zn Atomen auf den Gitterplätzen. Es zeigt einen Phasenübergang von Ordnung zu Unordnung bei $T_c = 733K$. Zur Beschreibung des Systems kann pro Platz folgende Ising Variable verwendet werden:

$$s_i = \begin{cases} +1 & \text{Zn} \\ -1 & \text{Cu} \end{cases}$$

Im Gegensatz zu kontinuierlichen Spins handelt es sich hierbei um keine Näherung, da auch das reale System ein Zwei-Zustands-System pro Platz ist.

Einfaches Modell für die Energie: Berücksichtige nur unterschiedliche Energien für verschiedene Nachbar-Paare von Atomen (a : Cu-Cu, b : Zn-Zn, c : Cu-Zn).

$$\begin{aligned} E_{ij} &= a(1 + s_i)(1 + s_j) + b(1 - s_i)(1 - s_j) + c(1 + s_i)(1 - s_j) + c(1 - s_i)(1 + s_j) \\ &= Js_i s_j - h \left(\frac{s_i + s_j}{2} \right) + const. \end{aligned}$$

$$J = a + b - 2c$$

$$h = 2b - 2a$$

Dieses einfache Modell beschreibt das kritische Verhalten von Messing gut. Verbesserung ist möglich wenn thermische Ausdehnung des Messings berücksichtigt wird (\Rightarrow Kopplungskonstanten sind Temperaturabhängig, $J(\beta)$, $h(\beta)$). Es ergeben sich mit guter Genauigkeit die gleichen kritischen Exponenten wie im Experiment.

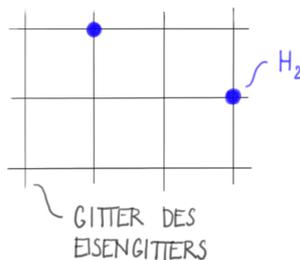
3.2.3 Gitter-Gas-Modell

Sehr grobes Modell eines Gases, mit diskretem Gitter:

$$s_i = \begin{cases} 1 & \text{Platz ist besetzt} \\ 0 & \text{Platz ist leer} \end{cases}$$

Es gibt in diesem Modell keine kinetische Energie und keine Impulse.

Anderer physikalischer Fall: Adsorbiert Wasserstoff auf einer Oberfläche (z.B: Eisen), so bildet sich ein Gitter der Größe der Substratome. Jeder Platz ist entweder mit H besetzt oder frei.



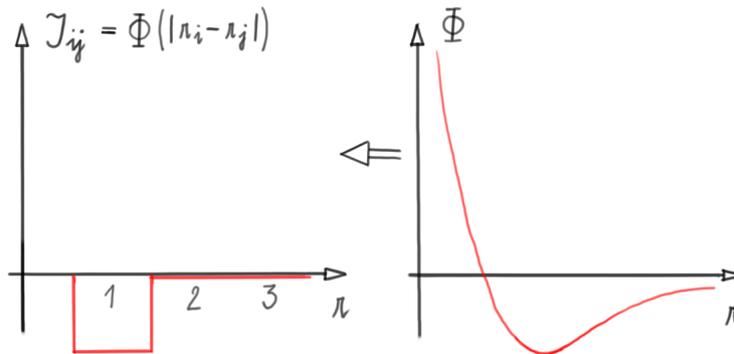
Der Hamilton kann geschrieben werden als

$$H = \sum_{ij} J_{ij} n_i n_j - \mu \sum_i n_i$$

wobei μ das chemische Potential ist.

$$J_{ij} = \Phi(|i - j|)$$

wobei Φ z.B. das Lennard-Jones-Potential sein kann. Als Näherung reicht attraktive Wechselwirkung nur mit nächsten Nachbarn (wegen Universalität ist die genaue Form der Wechselwirkung unwichtig).



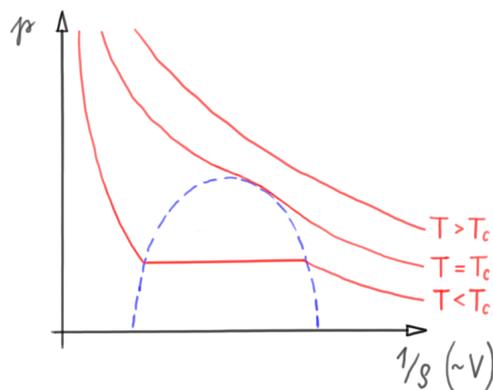
Die Dichte wird definiert als:

$$\rho = \frac{1}{N} \langle \sum_i n_i \rangle = \frac{1 + M}{2} \tag{3.1}$$

mit N der Anzahl der Gitterplätze und M der Magnetisierung in Spin-Sprache. Der Druck wird definiert als:

$$p = \frac{1}{N\beta} \ln Z$$

Die Zustandsgleichung $p(V)$ ähnelt stark einem realen Flüssigkeits-Gas System.



3.3 Potts-Modell

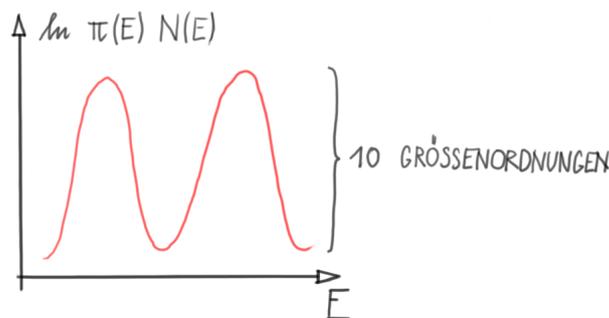
Verallgemeinerung des Ising-Modells: $\sigma_i = 1, 2, 3, \dots, q$ mit q der Anzahl an möglichen Zuständen pro Platz.

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + h \sum_i \delta_{\sigma_i, 1}$$

Potts-Modell ist bei $q = 2$ äquivalent zum Ising Modell ($s_i s_j = 2\delta_{s_i, s_j} - 1$). Daraus folgt $\beta_{\text{Potts}} = 2\beta_{\text{Ising}}$.

Realisierung z.B. bei Adsorption von Krypton auf Graphit (hat 3 Untergitter, nur eines der 3 lokalen Untergitter ist jeweils besetzt).

- Die Lösung ist in $d=2$ (Quadratgitter) exakt bekannt. Für $q \leq 4$ kontinuierlicher Phasenübergang und für $q > 4$ Phasenübergang 1. Ordnung. Je größer q desto ausgeprägter ist der Phasenübergang. Für $q \approx 10$ variiert die Wahrscheinlichkeit für eine gegebene Energie um ca. 10 Größenordnungen \Rightarrow Monte-Carlo Simulationen sind schwierig auf Grund ausgeprägter „Täler“ in der Energielandschaft.



- Andere Realisierung: Vereinfachung der QCD (Quanten-Chromo-Dynamik). Interne Symmetrie $SU(3)$ („Farb“-Freiheitsgrade). „Zentrum“ $Z(3)$ (Gruppe mit 3 Elementen, analog zu ± 1 für $SU(2)$ der Spins.)

3.4 Klassisches Heisenberg- und XY-Modell

QM: $\hat{H} =$ wie Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen

- Bei Materialien mit Hundscher Regel (Materialien mit hohen Orbitalen \Rightarrow viele Elektronen im Orbital)
- Hundsche Regel bevorzugt Spin in gleiche Richtung
- Oft Spin $n \cdot \frac{1}{2}$
- Hamilton Operator $\hat{H} \hat{=}$ Quantenmechanischem Operator wie oben (als eff. Modell)
($S^\pm : |j, m\rangle \rightarrow |j, m \pm 1\rangle$)
- Physik eines solchen Modells wird immer ähnlicher klassischer Physik
- Bei $S \rightarrow \infty$ erhält man Verhalten eines klassischen Spins \vec{S} . $|\vec{S}| = 1$ (Umnormierung notwendig : $\sqrt{S(S+1)}J \rightarrow J_{\text{klassisch}}$)

Wie groß ist unendlich?

- $S = \frac{5}{2}$ ist schon nahe am klassischen Ergebnis \rightarrow Manganate
- $S = \frac{3}{2}$ funktioniert „zur Not“

3.4.1 Spezialfall $J_z = 0$: klassisches XY-Modell

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y$$

Varianten: a) 3- komponentiger Spin b) 2- komponentiger Spin ($\hat{=}$ Winkelvariable)

!!Sprachverwirrung!!:

"Heisenbergmodell" $\hat{=}$

- Quantenmechanisch oder klassisch mit $d = 2$

"XY- Modell" $\hat{=}$

- Klassisch mit 2 Komponenten
- Klassisch mit 3 Komponenten
- Quantenmechanisch mit $d = 2$

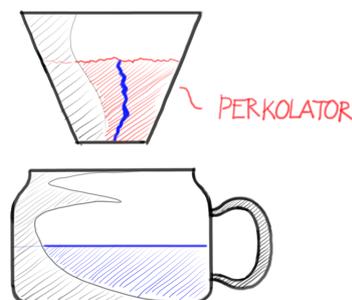
Beispiel Flüssigkeitskristalle ($d = 2$ dim) kleine Zylinder Ausrichtung \rightarrow Winkelvariable

Das "XY-Modell": **2 dim, 2 komponentig** $\hat{=}$ Kosterlitz-Thouless (KT- Phasenübergang)

- „unendliche Ordnung“ : Jede Ableitung von Z ist stetig
- PÜ ist 'topologisch' Dichte ("Kondensation") von Vortizes
- Relevant für PÜ der Hochtemperatur-Supraleiter (Schichtstruktur \rightarrow nur 2 Dimensionen \rightarrow Vortices schwer zu stören)
- siehe letztes Kapitel

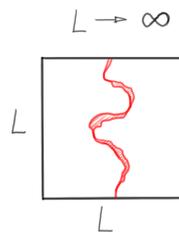
3.5 Perkolation

(Begriff "Perkulator": Kaffeemaschine)



3.5.1 Einfache Modelle

- Gitter, z.B. 2-dim, quadratisch
- Site Percolation: Variable: $n_i = 0,1$ auf Gitterplätzen n_i mit Wahrscheinlichkeit p ; keine zusätzliche Wechselwirkung d.h. Ising bei $J=0$ wie mit Magnetisierung $M = p - (1 - p)$
- Definiere "Cluster": als Gruppen mit benachbarten besetzten Plätzen, ohne Diagonale
- Fragestellungen:
 - Wie groß sind die Cluster? (Größenverteilung)
 - Bei welchem p gibt es (im Mittel) zumindest einen Cluster, der durch das ganze Gitter geht



- Wie viele Plätze sind in diesem Cluster
 - Geometrische Struktur ? (Man findet Fraktale)
- Bond-Percolation: analog, Variable $n_i, n_i = 0,1$ auf Gitterkanten

3.5.2 Anwendungen, Beispiele

- Kaffeefilter: Perkolations von Wasser
- Ölsuche:
 - Perkolations von Öl durch Gestein
 - Untersuche Bohrkern Fragen:
 - * Gibt es perkulierte Cluster \rightarrow dann kann Öl in Bohrstelle fließen
 - * Wie groß ist der Anteil des perkulierten Clusters am Volumen \rightarrow welcher Anteil des Öls kann gefördert werden
- Random Resistor Network: welche Leitfähigkeit besteht zwischen oben und unten (Hier zählt nicht die Gesamtgröße sondern die Größe des sogenannten „Backbones“ ohne Dangling Bonds)

Das alles führt zur Graphentheorie.

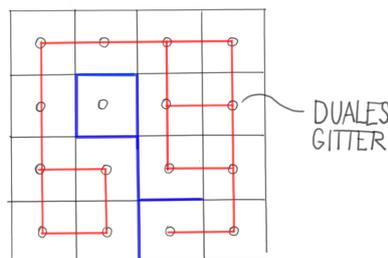
3.5.3 Beispiel für eine exakte Lösung

Kritische Wahrscheinlichkeit p_c für Bond-Perkolation auf dem Quadratgitter gesucht:

- Gitterkanten besetzt mit Wahrscheinlichkeit p
- Unten und oben verbunden ($L \rightarrow \infty$)

Lösung

Man führt ein duales Gitter ein.



- duale Gitter: Punkte in der Mitte der Quadrate des ursprünglichen Gitters
- Gegeben Bond-Konfiguration auf ursprünglichen Gitter, lege Bonds auf dualem Gitter überall dort, wo keine Bonds des ursprünglichen Gitters gekreuzt werden.
- wenn $p > p_c$, dann Perkulation auf ursprünglichem Gitter obereren Rand und unteren Rand (und rechts und links) Daraus folgt:
 - auf dualem Gitter keine Perkulation möglich
 - $q < q_c$
- Bonds auf ursprünglichem Gitter entsprechen 1 zu 1 Bonds auf dem dualen Gitter
- Konfiguration der Bonds auf dem dualen Gitter und zufällig mit Wahrscheinlichkeit $q = 1 - p$ genauso $p < p_c \Rightarrow q > q_c \Rightarrow p_c = \frac{1}{2}$ und $q_c = \frac{1}{2}$

3.5.4 Anwendungen der Perkolation

„Waldbrände“ (Site Perkolation)

Die Plätze eines quadratischen Gitters sind mit Wahrscheinlichkeit p mit „Bäumen“ besetzt. Bei einem „Brand“ startet das Feuer bei einem Punkt und breitet sich pro Zeitschritt je einen Platz horizontal und vertikal aus (siehe Abb. 3.1). In diesem Modell brennt jeder Platz nur einen Zeitschritt.

Typische Zeitskalen für die Dauer des Brandes sind:

p klein: Die Zeit t ist kurz (der Brand erlischt schnell), da nur ein kleiner Bereich rund um den Startpunkt zusammenhängt.

p groß: Hier wird t proportional zur linearen Ausdehnung L des Systems.

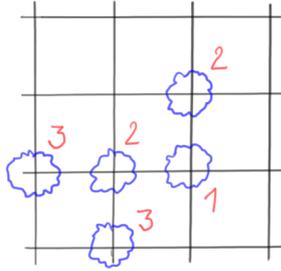


Abbildung 3.1: Verlauf der Site Perkolationsbahn. Die Zahlen geben jeweils einen Zeitschritt an

$p \approx p_c$: Bei einer kritischen Besetzungsdichte p_c braucht das Feuer lange, auf kurvigem Wege, um das System zu durchqueren.

Bei sehr großen L findet man:

$$t \sim \left(\frac{p - p_c}{p_c} \right)^{-Z} \quad (3.2)$$

Z wird als dynamisch kritischer Exponent bezeichnet, er beschreibt das Verhalten von Zeitskalen. Der Faktor $\frac{p-p_c}{p_c}$ divergiert, was als „Critical Slowing Down“ bezeichnet wird.

Nebenbemerkung: Dieses Slowing Down tritt auch bei Markov-Ketten-Monte-Carlo auf. Die Autokorrelationszeit verhält sich:

- nahe der kritischen Temperatur ($\xi \gg 1$) wie $\tau \sim \xi^Z$, was „Critical Slowing Down“ entspricht.
- bei tiefen Temperaturen wie $\tau \sim e^{\text{const} \cdot \beta \cdot \text{Vol}}$. Hier tritt „exponentielles Slowing Down“ auf.

3.6 Ising Modell: Fortuin-Kasteleyn-Darstellung

Diese Darstellung des Ising Modells ist sowohl für analytische Zugänge und exakte Beweise als auch für numerische Verfahren wichtig. Die Hamiltonfunktion des Isingmodells lautet:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (3.3)$$

wobei in der weiteren Betrachtung $h=0$ gesetzt wird. Damit ergibt sich die Zustandssumme wie folgt.

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{s\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j} = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J s_i s_j} \quad (3.4)$$

In der weiteren Betrachtung wird auch die Kopplungskonstante J weggelassen, da sie für die mathematischen Zusammenhänge nicht relevant ist. Der Faktor $e^{\beta s_i s_j}$ hat nur die zwei möglichen Werte $e^{\pm\beta}$. Umformulierung dieses Faktors zweimal angewendet ergibt:

$$e^{-\beta} e^{\beta s_i s_j} =: (1 - p) + p \delta_{s_i s_j} \quad \text{mit } p = 1 - e^{-2\beta} \quad (3.5)$$

$$e^{\beta s_i s_j} = e^\beta \sum_{g=0,1} \underbrace{(1 - p) \delta_{g,0} + p \delta_{s_i, s_j} \delta_{g,1}}_{W(s_i, s_j, g)} \quad (3.6)$$

Hier wurde eine künstliche neue Variable g eingeführt, um in weiterer Folge zu einer neuen Darstellung zu kommen. Glg. 3.6 eingesetzt in Glg. 3.4 ergibt die sogenannte ESFK Darstellung. ESFK steht hier für Edwards, Sokal, Fortuin, Kasteleyn (auch interessant „Sokal Hoax“).

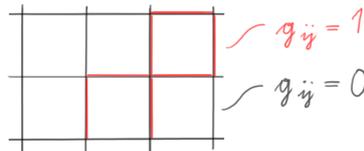
ESFK Darstellung

$$Z = \sum_{\{s\}} \sum_{\{g_{ij}=0,1\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^\beta W(s_i, s_j, g_{ij}) \quad (3.7)$$

Man betrachte eine feste Konfiguration der $\{g_{ij}\}$

$$W(s_i, s_j, g_{ij}) = (1 - p) \delta_{g_{ij},0} + p \delta_{s_i, s_j} \delta_{g_{ij},1}$$

Wenn also $g_{ij} = 1$ ist muss $s_i = s_j$ sein, sonst liefert der zweite Summand keinen Beitrag zu Z . Die Bereiche mit $\{g_{ij} = 1\}$ definieren also „Cluster“ in welchen die Spins jeweils den selben Wert haben müssen.



Leichte Umformung und Vertauschen der Summen (was bei endlicher Anzahl von Summanden erlaubt ist) ergibt die Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{g_{ij}\}} \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^\beta (1 - p) (\delta_{g_{ij},0} + \frac{p}{1 - p} \delta_{s_i, s_j} \delta_{g_{ij},1}) \quad (3.8)$$

Die Konfigurationen $\{g_{ij}\}$ definieren jeweils die Cluster. Die $\{s_i\}$ liefern jeweils nur Beiträge von gleichen Spins pro Cluster, es gibt also jeweils zwei Beiträge pro Cluster (alle Spins up oder down). Daraus ergibt sich die

Fortuin-Kasteleyn Darstellung

$$Z = \left(e^\beta (1 - p) \right)^{\#\text{Gitterkanten} \langle ij \rangle} \sum_{\{g_{ij}=0,1\}} \left(\frac{p}{1 - p} \right)^{\#g_{ij}=1} \cdot 2^{\#\text{Cluster}} \quad (3.9)$$

In dieser Darstellung existieren nun neue Variable g_{ij} , die auf den Gitterkanten existieren.

Cluster sind physikalisch relevant: Gebiete korrelierter Spins

Wir betrachten nun die Korrelationsfunktion

$$G(n, m) = \langle s_n s_m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_n s_m e^{-\beta H} \quad (3.10)$$

Die selben Transformationen wie zuvor führen auf

$$\sum_{\{s_i\}} s_n s_m e^{-\beta H} = \sum_{\{g_{ij}\}} \sum_{\{s_i\}} s_n s_m \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta(1-p)} \left(\delta_{g_{ij},0} + \frac{p}{1-p} \delta_{g_{ij},1} \delta_{s_i, s_j} \right) \quad (3.11)$$

Bei Betrachtung einer Konfiguration der g_{ij} , also Definition der Cluster ergeben sich 2 Fälle:

1. n und m liegen in verschiedenen Clustern.

Es gibt jeweils 4 Beiträge wie die Cluster in denen n und m liegen orientiert sein können: $s_n s_m = \uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow$ welche mit $s_n s_m = 1, -1, -1, 1$ zur Korrelationsfunktion beitragen. Da das Gewicht $W(s_i, s_j, g_{ij})$ immer gleich ist, verschwinden die Beiträge zu $G(i, j)$.

2. n und m liegen im selben Cluster

Nun müssen beide Spins gleich sein $s_n = s_m \Rightarrow s_n s_m = 1$

Diese Terme liefern den selben Beitrag wie bei der Zustandssumme

Damit kann $\langle s_n s_m \rangle$ auch über die $\sum_{\{g_{ij}\}}$ alleine ausgedrückt werden.

$$\langle \underbrace{s_n s_m}_{\text{Werte } \pm 1} \rangle = \frac{\sum_{\{g_{ij}\}} \delta(n, m \text{ selber Cluster}) \left[e^{\beta(1-p)} \right]^{\#Kanten} \left(\frac{p}{1-p} \right)^{\#g_{ij}=1} 2^{\#Cluster}}{\sum_{\{g_{ij}\}} 1 \underbrace{\left[e^{\beta(1-p)} \right]^{\#Kanten} \left(\frac{p}{1-p} \right)^{\#g_{ij}=1} 2^{\#Cluster}}_{W(\{g_{ij}\})}} \quad (3.12)$$

$$= \overbrace{\langle \delta(n, m \text{ selber Cluster}) \rangle}_{\text{Werte } 0,1} W(\{g_{ij}\}) \quad (3.13)$$

Man erhält also die Korrelationsfunktion ausgedrückt in den neuen „Bond-Variablen“ g_{ij} . Diese wird auch „Improved Estimator“ genannt, da die Varianz der Observablen $\delta(\dots)$ häufig kleiner ist als jene von $s_i s_j$.

3.6.1 Energie-Erwartungswert in FK-Darstellung

Energie $\langle E \rangle$ in der Bonddarstellung:

$$Z = e^{-\beta N_k} \sum_{\{g_{ij}=0,1\}} \left(e^{2\beta} - 1 \right)^{n_g} 2^{N_{cluster}} \quad (3.14)$$

mit N_k Anzahl Gitterkanten, n_g Anzahl der Bonds. Beachte das $N_{cluster}$ nicht von β abhängt, jedoch $\langle N_{cluster} \rangle$ schon.

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} = N_k - \frac{2 \langle n_g \rangle}{1 - e^{-2\beta}} \quad (3.15)$$

Alternativ:

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= \left\langle \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right\rangle = \sum_{\langle ij \rangle} \underbrace{\langle s_i s_j \rangle}_{=V \langle s_0 s_1 \rangle \text{ da translationsinvariant}} \\
 &= V n_{neig} \langle s_0 s_1 \rangle = V n_{neig} G(1) \\
 &= V n_{neig} \langle \delta(0 \text{ und } 1 \text{ im selben Cluster}) \rangle
 \end{aligned}
 \tag{3.16}$$

mit dem Systemvolumen $V = L^d$ und der Anzahl der nächsten Nachbarn $n_{neig} = 2d$.

3.7 Swendsen-Wang Algorithmus

Benutzt die ESFK-Darstellung. Idee: Monte Carlo im erweiterten Raum der $\{g_{ij}\}$ und $\{s_i\}$

Schritt 1: Gegeben eine Spin-Konfiguration $\{s_i\}$, wähle eine (neue) Bond-Konfiguration $\{g_{ij}\}$ gemäß der durch $W(s_i, s_j, g)$ gegebenen bedingten Wahrscheinlichkeit:

$$s_i \neq s_j \Rightarrow g_{ij} = 0$$

$$s_i = s_j \Rightarrow \text{Wahrscheinlichkeit für } g_{ij} = 1 \text{ ist } \frac{p}{p+(1-p)} = p$$

Schritt 2: Gegeben eine Bond-Konfiguration $\{g_{ij}\}$, wähle eine (neue) Spin-Konfiguration $\{s_i\}$ gemäß $W(s_i, s_j, g)$ mit der bedingten Wahrscheinlichkeit:

- In jedem Cluster müssen Spins gleich sein, unterschiedliche Cluster beliebig
- Wähle für jeden Cluster Spin \uparrow oder \downarrow mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$



Abbildung 3.2: Beispiel für die Iterationsschritte des Swendsen-Wang Algorithmus

Nebenbemerkung: In Schritt 2 ändern korrelierte Gebiete von Spins (Cluster) gemeinsam ihre Richtung. \Rightarrow viel schneller als einfaches „Single-Spin-Flip“ Monte Carlo, dort braucht man typischerweise $\mathcal{O}(2)$ Updates.

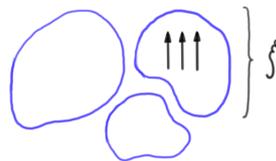


Abbildung 3.3: Zusammenhang zwischen Clustern und Korrelationslänge

3.7.1 Swendsen-Wang: Programmierung

- Separate Routine für Gittergeometrie: $j = \text{neighbour}(i, \mu)$, wobei μ die Richtungen nummeriert, z.B. $\mu = -2, -1, (0), 1, 2$ (allgemein von -Dimension bis +Dimension)
- Initialisierung: wähle (zufällig) eine Spin-Konfiguration
- Sweep:

Schritt 1: Gegeben Spins $\{s_i\}$, wähle Bonds $\{g_{ij}\}$ wie oben.

- Brauche Feld $\{g_{ij}\}$, initialisiere auf “-1” (unzulässiger Wert)
- Für alle i : alle μ : wähle $g_{i,i+\mu}$ wenn noch nicht gesetzt

Schritt 2: Gegeben $\{g_{ij}\}$:

- Bestimme Cluster, z.B. mit “Breadth First Search” (Vorteil: vektorisierbar, Alternativen: “Hoshen-Kopelman”, “Depth First Search” u.v.a.m.)
- Cluster fertig \Rightarrow Flip mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$

Breadth First Search

Brauche 2 Listen:

1. Für jeden Gitterplatz: Information, ob Gitterplatz schon einem Cluster zugeordnet ist
2. Liste der Plätze in Cluster mit Pointern auf den aktuell bearbeiteten Gitterplatz (current) und auf das Ende der Liste (end)

Schleife über alle Gitterplätze i :

- Wenn i schon in Cluster \Rightarrow nächstes i
- sonst:
 - Trage i an das Ende der Liste ein, setze current auf Listenplatz von i
 - Gehe zu allen Nachbarn j von i , wenn $g_{ij} = 1$ füge j zur Liste hinzu und markiere j als in einem Cluster
 - Neue Listenelemente so abarbeiten bis die Liste nicht mehr wächst

3.8 „Single-Cluster“-Variante von Swendsen Wang

Erfinder: U. Wolff bzw. M. Hasenbusch (zur selben Zeit)

- Betrachte eine Konfiguration von Swendsen-Wang Cluster
- Monte-Carlo-Update (Modifizierter „Schritt 2“ von Swendsen Wang)
 - Wähle einen zufälligen Gitterplatz
 - Flip des zugehörigen Clusters mit 100% Wahrscheinlichkeit
 Detailed Balance: $p(\{s\} \rightarrow \{s'\}) = p(\text{Platz in entspr. Cluster zu wählen}) \underbrace{p(\text{Spins drehen})}_{=100\%} =$
 $p(\{s'\} \rightarrow \{s\})$
- Effizientere Version von Schritt 1

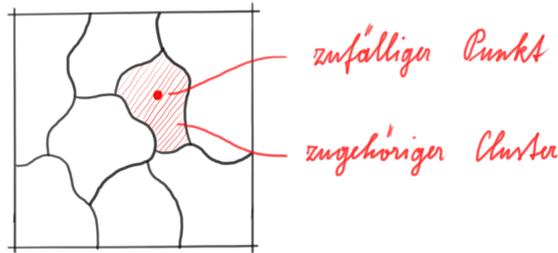


Abbildung 3.4: Swendsen Wang Cluster mit zufällig ausgewähltem Gitterpunkt

1. Zufälligen Platz auswählen
 2. Cluster um diesen Platz herum konstruieren (und Bonds setzen)
 3. Flip bonds
- Vorteil: Die Wahrscheinlichkeit, dass der Zufällig gewählte Platz in einem Cluster liegt ist proportional zum Volumen des Clusters \rightarrow im Mittel werden größere Cluster bestimmt \rightarrow im Mittel größere Änderung der Spin Konfiguration.
Tatsächlich: kleinere Autokorrelationen (kleinerer Wert von „z“)
 $\tau_{int}(\mathcal{O}) \sim \xi^{z_{int}(\mathcal{O})}$ (genauer: $\sim \min(L, \xi)^z$)
 $\tau_{int} \dots$ Integrierte Autokorrelationszeit
 $\mathcal{O} \dots$ Observable

τ_{int} wird benötigt, um die wahre Varianz einer Observablen zu bestimmen:

$$\underbrace{\text{var}(\bar{\mathcal{O}})}_{\text{Var.Mittelwert}} = \frac{2\tau_{int}}{n} \underbrace{\text{var}(\mathcal{O}_i)}_{\text{naiveVarianz}}$$

Vergleich von $z_{int}(\text{Energie})$ der verschiedenen Algorithmen am Ising Modell:

Dimension	Metropolis Single Spin Flip	Swendsen Wang	Single Cluster (Wolff Cluster)
d = 2	≈ 2.17	$\approx 0.25^*$	$\approx 0.25^*$
d = 3	≈ 2.02	≈ 0.54	≈ 0.33
d = 4	≈ 2	≈ 0.9	$\approx 0.25^*$

Werte mit * könnten auch einen logarithmischen Zusammenhang haben.

Einheit von τ_{int} hier: „Sweep“ im Mittel und jeder Gitterplatz einmal behandelt.

3.9 Simulation unendlich großer Systeme mit Cluster-Verfahren

3.9.1 Endlich große Systeme

Periodic boundary condition (p.b.c.): Spin-Korrelationsfunktion $G(r) = \langle s_j s_{j+1} \rangle = \sum_i c_i e^{r/\xi_i}$ ist eine Summe von Exponentialfunktionen. Für große r dominiert die Exponentialfunktion mit größtem ξ_i . Mit p.b.c. ist das System symmetrisch um $r = \frac{L}{2}$ und somit ist:

$$G(r) \sim e^{-r/\xi} + e^{-(L-r)/\xi} = e^{-0.5L/\xi} \cosh\left(\frac{r-0.5L}{\xi}\right)$$

Extrapolation zu $L \rightarrow \infty$ ist schwierig (siehe Abb. 3.6) (\rightarrow „Finite Size Scaling“ gibt Information über kritischen Exponenten).

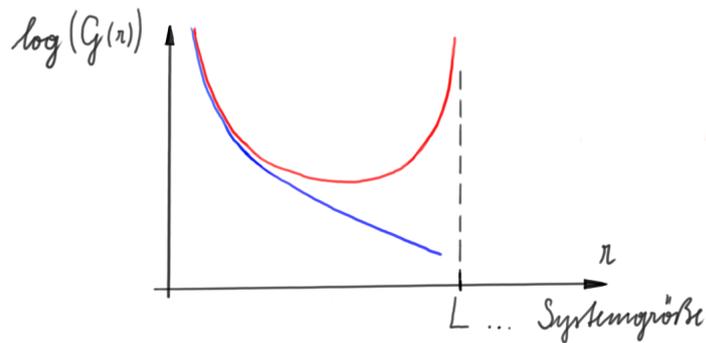


Abbildung 3.5: Spin-Korrelationsfunktion semilogarithmisch über dem Abstand zweier Spins

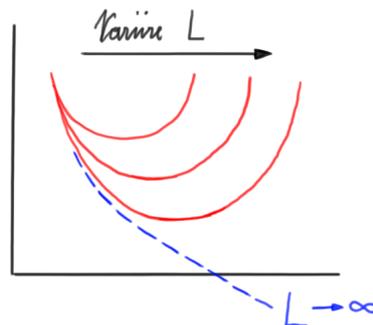


Abbildung 3.6: Spin-Korrelationsfunktion semilogarithmisch über dem Abstand zweier Spins. Das System ist jeweils um $r = \frac{L}{2}$ symmetrisch. Der anfängliche exponentielle Abfall nähert sich von oben der Korrelationsfunktion für $L \rightarrow \infty$

3.9.2 Unendlich große Systeme

Basiert auf dem Single-Cluster-Verfahren (endliche Größe):

1. Starte immer mit dem selben Startpunkt „0“ (in der Mitte des Systems). Dies ist möglich da ein unendlich großes System translationsinvariant ist.
2. Anfangskonfiguration der Spins: z.b. Neel Konfiguration (Nachbarspins sind immer antiparallel). Die Anfangskonfiguration sollte keine ferromagnetische Konfiguration sein, denn sonst könnte der Cluster unendlich groß werden, obwohl die Temperatur höher als die kritische Temperatur ist.
3. Berechne den Cluster und update ihn und wiederhole diesen Schritt immer wieder (vgl. Abbildung 3.7).

Nach n Schritten konnte maximal eine Distanz von n vom Anfangszustand erreicht werden (Bei Neel Konfiguration als Startkonfiguration; Distanz wird exakt erreicht wenn $p = 1 \rightarrow T = 0$)

Von Interesse ist meist $T \approx T_c$, dann wächst die maximale Gittergröße langsam (siehe unten).

Die Umgebung des Startpunktes equilibriert relativ schnell, jedoch brauchen weiter entfernte Punkte länger zum equilibrieren, da der Cluster nicht jedes mal bis dorthin wächst (Korrelationsfunktion für Spins im Abstand r : $\langle s_0 s_r \rangle = \langle \delta(0 \text{ und } r \text{ im selben Cluster}) \rangle \sim e^{-r/\xi}$ bei großen Abständen)

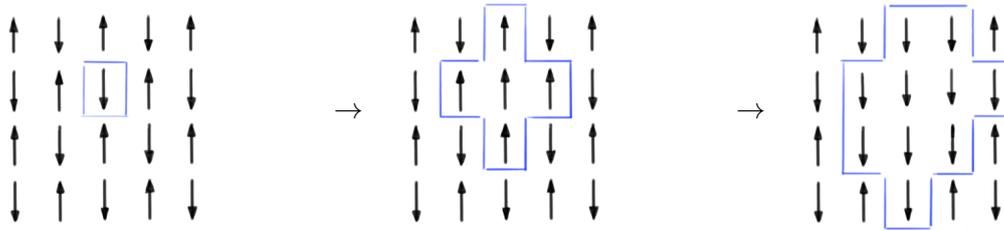


Abbildung 3.7: Beispiel des Algorithmus. Zuerst wird beim System der mittlere Spin ausgewählt, der zugehörige Cluster bestimmt (wie beim Single-Cluster-Verfahren) und dann der Cluster gedreht. Dieses Vorgehen wird wiederholt.

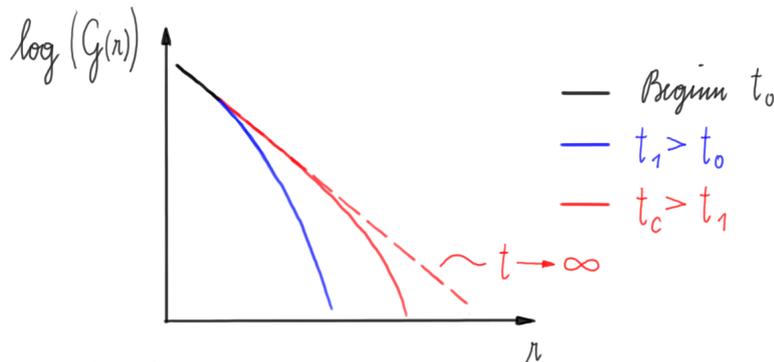


Abbildung 3.8: Spin-Korrelationsfunktion semilogarithmisch zu verschiedenen Laufzeiten. Die Messpunkte nähern sich von unten an die Spin-Korrelationsfunktion des unendlich großen Systems an.

Im equilibrierten Bereich ist die Wahrscheinlichkeit, dass der Cluster den Abstand r erreicht (= irgendein Spin mit Abstand r), gleich $\langle s_0 s_r \rangle \sim r e^{-r/\xi}$. Somit equilibriert mit fortschreitender MC-Zeit eine immer größere Region um den Anfangspunkt. Wird der Rand des endlichen Systems erreicht (was einen Ausschnitt des unendlich großen System darstellt) so muss das System mitwachsen. Jedoch wird das System nicht größer als ca. $L \sim 2 \cdot 10\xi$, da $10e^{-10} \approx 0.04\%$.

Die logarithmische Spin-Korrelationsfunktion nähert sich bei diesem Verfahren von unten an die des unendlich großen Systems an (vgl. Abbildung 3.8)(im Gegensatz zum System mit p.b.c.).

Einschränkungen:

- $T > T_c$, da sonst Clustergröße divergiert
- Es muss eine Swendsen-Wang-artige Cluster-Darstellung geben (Ising-Modell, Potts-Modell, Spin $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Modell, Loop-Algorithmus; alle ohne Magnetfeld)
- Funktioniert nicht bei frustrierten Modellen

Um die Autokorrelationsfunktion zu berechnen wird über jeden einzelnen Punkt Statistik geführt. Es werden erst Messpunkte für einen Punkt erhoben, wenn das System an diesem Punkt anfängt zu equilibrieren, z.B. wenn der Spin schon z.B. 10 mal gedreht wurde (anstatt der Thermalisierung).

τ_{int} wird folgendermaßen bestimmt (vgl. Abbildung 3.9) $\tau_{int} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{max} \rho(t) (1 - \frac{t}{N})$

Die ersten Datenpunkte ($\rho(t < t_1)$) können so verwendet werden. Nach t_1 werden die Daten mit einer Exponentialfunktion genähert ($\sum_{t=t_1}^{t_{max}} c e^{-t/\tau} = c \sum_{t=t_1}^{t_{max}} (e^{-1/\tau})^t \approx c\tau$) und die Datenpunkte, die nur noch aus Rauschen bestehen, werden verworfen.

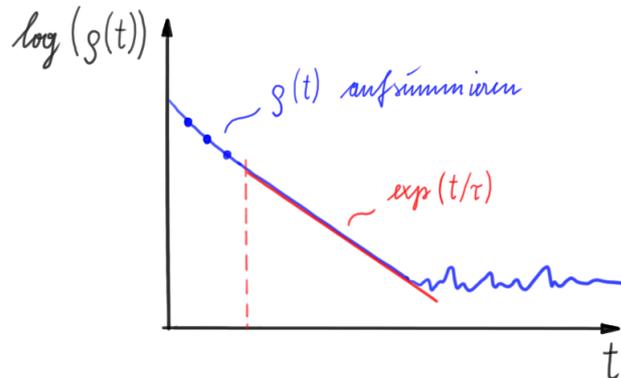


Abbildung 3.9: Um τ_{int} zu bestimmen, wird die logarithmische Autokorrelation in 3 Teile unterteilt. Im ersten Teil werden die Daten einfach addiert, im zweiten werden sie mit einer Exponentialfunktion genähert und die Daten im dritten Bereich werden verworfen.

3.10 Systeme mit Magnetfeld ($h > 0$)

2 Möglichkeiten:

1) Ghost-Spin

Erweitere den Hamilton mit einem Ghost-Spin $s_0 = 1$

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i s_0 \quad (3.17)$$

Jeder Spin koppelt mit dem Ghost-Spin s_0 mit Stärke h . Formalismus wie zuvor (Cluster-Methoden) kann beinahe unverändert beibehalten werden. Da der Ghost-Spin immer Wert $+1$ hat, kann ein Cluster, der den Ghost-Spin beinhaltet, nicht gedreht werden. Deshalb kann man die Clustererstellung abbrechen, sobald man auf s_0 trifft. Der Ghost-Spin kann auch mehrere eigentlich getrennte Cluster mit Spin $+1$ miteinander verbinden.

Bei großen βh sind die meisten Gitterplätze mit s_0 verbunden was gleichbedeutend mit einem magnetisierten System ist ($\langle M \rangle \approx 1$). Außerdem ist die Effizienz (empirisch) bei Swendsen-Wang und Single-Spin-Flip etwa gleich (mit niedrigen Autokorrelationszeiten).

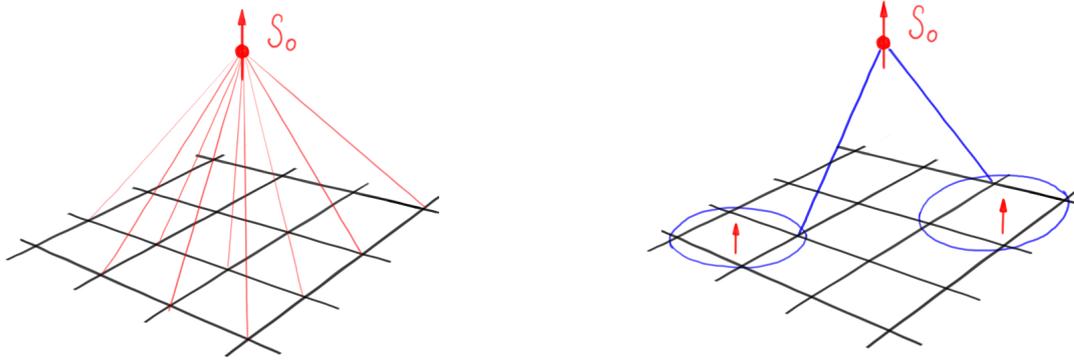


Abbildung 3.10: Ghost Spins sind mit allen Punkten im Gitter verbunden (Kopplungsstärke h). Es können daher eigentlich getrennte Cluster über den Ghost Spin verbunden sein.

2) Normale Cluster, geänderte Flipwahrscheinlichkeit

ESFK:

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{\{s_i\}} \sum_{\{g_{ij}\}} \sum_{\langle ij \rangle} e^{\beta \underbrace{e^{-\beta} e^{s_i s_j}}_{(1-p)\delta_{g_{ij},0} + p\delta_{g_{ij},1} \delta_{s_i s_j}}} e^{-h \sum_i s_i} \\
 &= e^{-\beta N_k} \sum_{\{g_{ij}\}} \left(\frac{p}{1-p} \right)^{\#g_{ij}=1} \underbrace{\prod_{\text{Cluster}} (e^{hV_c} + e^{-hV_c})}_{=2^{\#\text{Cluster}} \text{ für } h=0}
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Mit dem Clustervolumen V_c .

Für Cluster-Algorithmus: Wechsel für

$$\text{Spin } \uparrow: \frac{e^{hV_c}}{e^{hV_c} + e^{-hV_c}}$$

$$\text{Spin } \downarrow: \frac{e^{-hV_c}}{e^{hV_c} + e^{-hV_c}}$$

Weitere Alternativen

1. Geometrische Cluster Allgemein: behandle 2 Systeme gleichzeitig (eines mit h und eines mit $-h$)
2. „Wurm Algorithmus“ (später)

3.11 Berechnung von Korrelationsfunktion und Suszeptibilität in Cluster-Darstellung

3.11.1 Swendsen-Wang

Die Korrelationsfunktion berechnet sich wie in der Fortuin-Kasteleyn Darstellung definiert: $\langle s_i s_j \rangle = \langle \delta(\text{Platz } i \text{ und } j \text{ im selben Cluster}) \rangle_{FK}$.

Für die Suszeptibilität χ gilt:

$$\begin{aligned}
 \chi &= \beta \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) \stackrel{h=0}{=} \beta \langle M^2 \rangle \\
 &= \beta \left\langle \left(\sum_i s_i \right) \left(\sum_j s_j \right) \right\rangle \\
 &= \beta \left\langle \sum_{Cluster} \sum_{i \text{ in } Cluster} \sum_j s_i s_j \right\rangle \\
 &= \beta \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} p_s \sum_{Cluster} \sum_{i \text{ in } Cluster} \sum_j s_i s_j
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

- i und j in unterschiedlichen Clustern
 $s_i s_j = \{1, 1, -1, -1\} \rightarrow \sum_{\{s\}} \dots = 0$
- i und j im selben Cluster
 $s_i s_j = 1 \rightarrow \sum_j s_i s_j = V_C$

$$\chi = \beta \left\langle \sum_{Cluster} \sum_{i \text{ in } Cluster} V_c \right\rangle = \beta \left\langle \sum_{Cluster} V_c^2 \right\rangle \tag{3.20}$$

3.11.2 Single Cluster

Korrelationsfunktion und Suszeptibilität:

$$G(i, j) = G(i - j) = \langle s_i s_j \rangle = \left\langle \frac{1}{V_c} \delta(\text{Platz } i \text{ und } j \text{ im Single-Cluster}) \right\rangle_{\text{Single-Cluster}} \tag{3.21}$$

$$\chi \propto \langle M^2 \rangle = \sum_{ij} \langle s_i s_j \rangle \propto \langle V_c \rangle \tag{3.22}$$

Energie: Für Systeme ohne Magnetfeld ($h=0$) auf einem Quadratgitter lässt sich die Energie $E = \langle H \rangle$ über die Korrelationsfunktion im Abstand $r=1$ ausdrücken. Die Summe über alle Nachbarpaare $\langle ij \rangle$ in der Hamiltonfunktion kann wie folgt umgeformt werden:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j = -J \sum_i (s_i s_{i+e_x} + s_i s_{i+e_y}) \tag{3.23}$$

wobei $i + e_x$ und $i + e_y$ den Nachbarplätzen von i in $+x$ bzw. $+y$ Richtung entsprechen. Für die Energie ergibt sich, unter Ausnutzung der Translationsinvarianz des Systems:

$$E = -J \sum_i (\langle s_i s_{i+e_x} \rangle + \langle s_i s_{i+e_y} \rangle) = -J \sum_i (G(1) + G(1)) = -2JV_G(1)$$

$$\frac{E}{V} = -2JG(1) \quad \text{für Ferromagnet} \tag{3.24}$$

Die Korrelationsfunktion $G(1)$ lässt sich sowohl in Spin-Darstellung ($G(r) = \langle s_i s_{i+r} \rangle = \langle O_s \rangle$) als auch in Bonds-Darstellung (siehe (3.21), $G(r) = \langle O_b \rangle$) berechnen. Zweitere Methode ist aufgrund der kleineren Varianz der Observablen von Vorteil, wie man mit der Annahme $G(r) \propto e^{-r/\xi}$ für große Abstände sieht:

$$\begin{aligned}
 \text{Spin-Bild:} \quad O_s &\in \{\pm 1\}, \quad \text{var}(O_s) = \langle O_s^2 \rangle - \langle O_s \rangle^2 = \langle 1 \rangle - G(r)^2 \approx 1, \quad \text{für } r \text{ groß} \\
 \text{Bonds-Bild:} \quad O_b &\in \{0, 1\}, \quad \text{var}(O_b) = \langle O_b^2 \rangle - \langle O_b \rangle^2 \stackrel{O_b^2=O_b}{=} G(r) - G(r)^2 \approx G(r) \ll 1
 \end{aligned}$$

3.12 Cluster für $\mathcal{O}(N)$ -Modelle

Im auf U.WOLFF zurückgehenden $\mathcal{O}(N)$ -Modell ähnelt der Hamilton-Operator formal dem des Ising-Modells, jedoch mit N-komponentigen (Spin-)Vektoren \vec{s}_i anstelle der binären Spinvariablen s_i . Die Dimension N der Spinvektoren ist dabei unabhängig von Dimension und Struktur des Raunggitters.

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \tag{3.25}$$

$$\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = |\vec{s}_i| |\vec{s}_j| \cos(\theta_{ij}) \tag{3.26}$$

	N	Spin-Komponenten	Beschreibung
Beispiele:	3	(x,y,z)	$\mathcal{O}(3)$ -Modell
	2	(x,y)	$\mathcal{O}(2)$ -Modell \equiv XY-Modell
	1	(x)	$\mathcal{O}(1)$ -Modell \equiv $\mathcal{Z}(2)$ \equiv Ising-Modell

Cluster-Algorithmus

Basiert auf der stochastischen Einbettung eines Ising-Modells. Für jedes Update:

- Wähle zufällig eine Richtung $\vec{R} \in \mathcal{O}(N)$. $|\vec{R}| = 1$.
- Projiziere alle Spins auf \vec{R} :

$$\vec{s}_i = \vec{s}_i^{\parallel} + \vec{s}_i^{\perp} \quad \text{mit} \quad \vec{s}_i^{\parallel} = (\vec{s}_i \cdot \vec{R}) \vec{R} \quad , \quad \vec{s}_i^{\perp} = \vec{s}_i - \vec{s}_i^{\parallel}$$

- Ising-Variable (bzw. Update) \equiv Flip der projizierten Spinkomponente \vec{s}_i^{\parallel} auf $-\vec{s}_i^{\parallel}$ und vice versa (siehe Abb. 3.11). Auswirkung auf die Hamiltonfunktion:

$$H = -J \sum_{ij} (\vec{s}_i^{\parallel} \cdot \vec{s}_j^{\parallel} + \underbrace{\vec{s}_i^{\perp} \cdot \vec{s}_j^{\perp}}_{\text{bleibt bei Update konstant}}) \tag{3.27}$$

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \tau_i \tau_j + const \tag{3.28}$$

mit $\tau_i, \tau_j \in \{-1, 1\}$ und $J_{ij} = J |\vec{s}_i^{\parallel} \cdot \vec{s}_j^{\parallel}|$, was einem Ising-Modell mit Kopplungen J_{ij} entspricht.

- Cluster-Darstellung und Cluster-Update wie zuvor, jedoch mit Kopplungen J_{ij} , daher auch Flip-Wahrscheinlichkeit abhängig von i,j:

$$p \rightarrow p_{ij} = 1 - e^{-2\beta J_{ij}} \tag{3.29}$$

Ähnlich: Höhen-Modelle "SOS - Solid on Solid"

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} |h_i - h_j| \tag{3.30}$$

Hier: Wähle eine Referenzhöhe R (bzw. Referenzebene in 2D).

Update: Spiegelung an der Referenzebene R

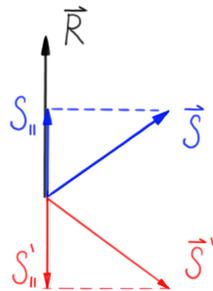


Abbildung 3.11: Ising-Update beim $\mathcal{O}(N)$ -Modell: Flip der Komponente S_{\parallel} parallel zur Referenzrichtung \vec{R} ergibt den neuen Spinvektor \vec{S}'

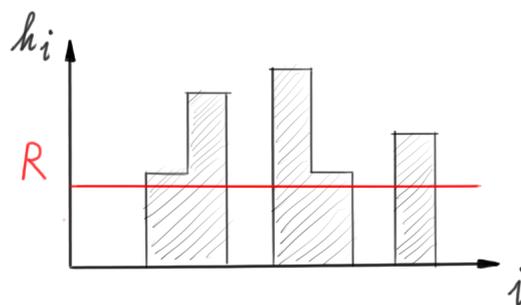


Abbildung 3.12: Veranschaulichung des Höhenmodells. Die rote Linie kennzeichnet die für ein Update gewählte Referenzhöhe R .

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 physikalisch.
- Wie verhält sich ein physikalisches System bei großem L und $L \rightarrow \infty$?
 - Auch für die Auswertung von Rechnungen bei endlichem L
 - Enthält Informationen über kritische Exponenten
- Verwandte Frage: Reale Systeme sind endlich groß \rightarrow Wieso beobachtet man Phasenübergänge?

4.1 Systeme der Größe L^d

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

4.1.1 Suszeptibilität pro Platz

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

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

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

Kritisches Verhalten

Für T nahe T_c verhält sich das System wie folgt:

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

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

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 ($\xi = \xi_\infty$).

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:

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

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

Grenzfälle

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

$$\frac{\chi}{V}(L = \infty, T) \propto |t|^{-\gamma} \rightarrow g(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} const \quad (4.6)$$

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:

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

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

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

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} .

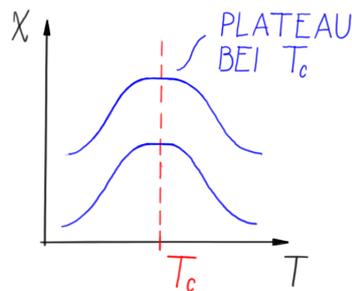


Abbildung 4.1: Veranschaulichung des Bereichs um T_c , in dem χ (näherungsweise) konstant ist.

4.1.2 Spezifische Wärme

Analog zur Betrachtung für die Suszeptibilität findet man:

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

4.1.3 Allgemein

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

$$\begin{aligned}
 Q(L, T) &\equiv Q(L, |t|) = |t|^y f_1\left(\frac{L}{\xi(t)}\right) = |t|^y f_2\left(\frac{L}{a|t|^{-\nu}}\right) = |t|^y f_3\left(L^{1/\nu}|t|\right) \\
 L^{y/\nu} Q(L, |t|) &= \left(L^{1/\nu}|t|\right)^y f_3\left(L^{1/\nu}|t|\right) \\
 \boxed{L^{y/\nu} Q(L, |t|) = f\left(L^{1/\nu}|t|\right)} & \tag{4.10}
 \end{aligned}$$

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

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.

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

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

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. $1 \ll \xi \leq L \Rightarrow$ kritisches Verhalten des d -dimensionalen Systems \rightarrow 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 \rightarrow 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.
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.

5 Mean Field

5.1 Mean Field für das Ising-Modell

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

$$s_i s_j = [(s_i - M) + M] [(s_j - M) + M] = M(s_i + s_j) - M^2 + (s_i - M)(s_j - M)$$

Wenn $M = \langle s_i \rangle$ dann ist $(s_i - M)(s_j - M)$ eine Korrelation der Fluktuation. Diese wird Vernachlässigt! Somit gilt: $s_i s_j \approx M(s_i + s_j) - M^2$. M^2 ist nicht von der Spinkonfiguration abhängig, jedoch von der Temperatur und der Systemgröße. Sie wird im folgenden nicht mitgeschrieben.

$H \approx H_{MF} = -J \sum_{\langle ij \rangle} M(s_i + s_j) - h \sum_i s_i = - \sum_i s_i \underbrace{(qMJ + h)}_{\text{eff. Magnetfeld + Molekularfeld}}$
--

Mit der Koordinationszahl q .

In H_{MF} sind die Spins formal unabhängig. Jedoch gilt zusätzlich die Konsistenzbedingung:

$$M = \langle s_i \rangle.$$

5.1.1 Magnetisierung in Ising-Modell mit Mean Field

$$\begin{aligned} \langle s_j \rangle_{MF} &= \frac{\sum_{\{s\}} s_j e^{-\beta H_{MF}}}{\sum_{\{s\}} e^{-\beta H_{MF}}} = \frac{\sum_{s_j = \pm 1} s_j e^{\beta s_j [qMJ + h]} \prod_{i \neq j} \sum_{s_i = \pm 1} e^{\beta s_i [qMJ + h]}}{\prod_i \sum_{s_i = \pm 1} e^{\beta s_i [qMJ + h]}} \\ &= \frac{2 \sinh(\beta(qMJ + h))}{\sum_{s_j = \pm 1} s_j e^{s_j \beta [qMJ + h]}} = \tanh \beta(qMJ + h) = M \\ &= \frac{\sum_{s_j = \pm 1} e^{s_j \beta [qMJ + h]}}{2 \cosh(\beta(qMJ + h))} \end{aligned}$$

Somit erhalten wir die Selbstkonsistenzbedingung:

$$M = \tanh(\beta(qMJ + h)) \tag{5.1}$$

Es gibt 3 Lösungen (bei $h = 0$):

1. $M = 0$

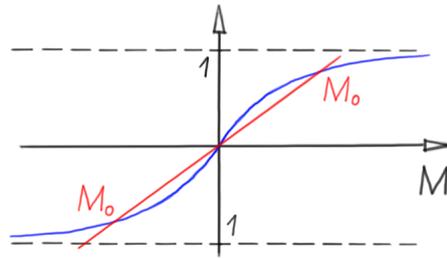


Abbildung 5.1: Lösungen bei $h = 0$

2. $M = \pm M_0$ (nur wenn $\beta q J > 1$)

Zustandssumme: $Z = 2^N \cosh(\beta q J M)^N = e^{-\beta F}$

$Z(M = M_0) > Z(M = 0)$ (weil $Z(M = M_0)$ kleinere freie Energie).

wenn $\beta_c q J = 1$ dann gilt:

$k_b T_c = q J$ in Mean Field Näherung.

In Mean Field hängt $\frac{k_b T_c}{J}$ nur von q ab, jedoch nicht von der Gitterstruktur (z.B. Dimension).

Beispiel: kubisches Gitter ($d = 3$) und Dreiecksgitter ($d = 2$) haben beide $q = 6$.

	q	$\frac{k_b T_c}{J q}$ in MF	Exakt
1d Kette	2	1	0
2d quadr. Gitter	4	1	0.567...
3d kubisches Gitter	6	1	$\approx 0.752...$
4d hyperkubisch	8	1	1

- Näherung immer besser bei zunehmender Koordinationszahl
- Exakt oberhalb der „kritischer Dimension“ (=4 für Ising \Leftrightarrow RG)
- Mean Field vernachlässigt $G_c(r) = \langle (s_i - \underbrace{\langle s_j \rangle}_{=M})(s_{i+r} - \underbrace{\langle s_{i+r} \rangle}_{=M}) \rangle \propto e^{-\frac{r}{\xi}}$
- Tatsächlich: Mean Field wird besser bei kleinem ξ , d.h. weg von T_c
- Die Mean Field Näherung erhält man auch bei unendlicher Dimension oder auch bei unendlicher Reichweite der Wechselwirkung.

$h = 0$:

1. Große Koordinationszahl

$$H_q = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j = -J \sum_i s_i \underbrace{\sum_{\substack{j \text{ n.n. zu } i \\ \approx qM}} s_j}_{\approx qM} \approx -qJM \sum_i s_i \approx -qJM^2$$

2. Unendliche Reichweite

$$H_{\text{inf}} = -J \sum_{i,j \neq i} s_i s_j \frac{1}{N} q = -\frac{Jq}{N} \sum_i s_i \underbrace{\sum_{j \neq i} s_j}_{\approx (N-1)M} = -\frac{N-1}{N} qJM \sum_i s_i$$

Der Faktor q ist Konvention und der Faktor $\frac{1}{N}$ wurde eingefügt damit H nicht divergiert (Energie pro Platz)

Bsp aus Quantenmechanik: Vielteilchentheorie: DMFT (Dynamical Mean Field Theory)

5.2 Bethe-Näherung

- Systematische Verbesserung von Mean-Field durch Hinzunahme weiterer Nachbarn
- Einfachste Variante (Bethe: Berücksichtige nächste Nachbarn)

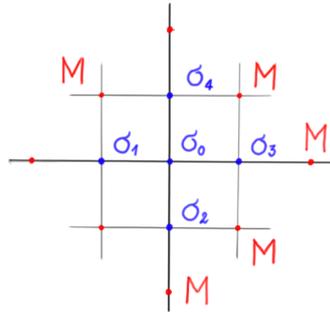


Abbildung 5.2: Schema Bethe-Näherung

$$H = -J s_0 \sum_{j=1}^q s_j - h s_0 - h' \sum_{j=1}^q s_j$$

$h' \dots$ eff. Magnetfeld durch Spins außerhalb des „Clusters“: $h' = h + (q - 1)M$

Selbstkonsistenz: $\langle s_0 \rangle \stackrel{!}{=} \langle s_j \rangle = M$ Nach Umformen erhält man:

$$\dots = \frac{\cosh[\beta(J + h')]}{\cosh[\beta(J - h')]} = e^{2\beta h'}$$

Bedingung für h' und damit auch für M .

$h = 0$:

Lösung: $M = 0$ wenn $\beta > \beta_c$ mit $\coth(\beta_c J) = q - 1$

Bsp. $d = 2$ Quadratgitter

	Mean Field	Bethe	Exakt
$\frac{k_b T_c}{J}$	4	2.885...	2.269...

- d.h. T_c viel besser als mit ursprünglichen MF
- Noch besser mit größerem Cluster
- Aber: die Wechselwirkung bei großen Abständen wird immer noch vernachlässigt:

dieselben krit. Exponenten wie im ursprünglichen Mean Field

5.3 Mean Field als Variationsansatz

Nun wollen wir durch Variation der freien Energie Konsistenzgleichungen der Mean Field Theorie berechnen.

5.3.1 Bogoliubov-Ungleichung

Bei beliebiger Aufspaltung der Hamiltonfunktion $H = H_0 + H_1$ folgt

$$\frac{Z}{Z_0} = \frac{\sum_s e^{-\beta(H_0+H_1)}}{\sum_s e^{-\beta H_0}} = \langle e^{-\beta H_1} \rangle_0 \quad (5.2)$$

Damit ist der Erwartungswert einer Observablen in der Verteilung 0 gegeben

$$\langle O \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum_s O(s) e^{-\beta H_0(s)}$$

Mathematisch gilt für eine reelle Funktion $f(x)$ allgemein

$$\langle e^{f(x)} \rangle_{W(x)} \geq e^{\langle f(x) \rangle_{W(x)}} \quad (5.3)$$

bezüglich einer positiven Verteilung $W(x) \geq 0$. Damit ist

$$\frac{Z}{Z_0} \geq e^{-\beta \langle H_1 \rangle_0}$$

und mit der Definition der freien Energie $F = -k_B T \ln Z$ folgt die

Bogoliubov-Ungleichung

$$\boxed{F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0} \quad (5.4)$$

Wenn man H_1 so wählen kann, dass $\langle H_1 \rangle_0 \leq 0$ gilt, dann ergibt dies eine obere Schranke für die Freie Energie. Dies ist natürlich nur dann nützlich, wenn F_0 berechenbar ist.

5.3.2 Anwendung für Mean Field

Wir wählen H_0 nun so, dass die Variablen $\{s_i\}$ in H_0 nicht miteinander, sondern nur mit einem „effektiven Potential“ $V(\{\lambda^{(j)}\})$ mit den Parametern $\{\lambda^{(j)}\}$ wechselwirken.

Beispiel: $H_0 = \sum_i f(s_i, \{\lambda\})$

Mean Field erhält man, wenn man die Parameter $\{\lambda\}$ so variiert, dass die freie Energie $F_{var}(\{\lambda\}) := F_0(\{\lambda\}) + \langle H_1(\{\lambda\}) \rangle_0$ minimiert wird.

Beispiel: Ising

Wir wählen $H_0 = -\lambda \sum_i s_i$ (Paramagnet) mit der Zustandssumme

$$Z_0 = \sum_{\{s_i=\pm 1\}} e^{-\beta H_0} = \prod_i \left(\sum_{s=\pm 1} e^{-\beta \lambda s} \right) = (2 \cosh(\beta \lambda))^N$$

wobei N die Gesamtanzahl der Spins darstellt. H_1 ergibt sich dann entsprechend der Aufspaltung von H zu

$$H_1 \equiv H - H_0 = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + (\lambda - h) \sum_i s_i \quad (5.5)$$

mit den **Erwartungswerten**:

$$\begin{aligned}\langle s_j \rangle_0 &= \dots = \tanh(\beta\lambda) \\ \langle s_i s_j \rangle_0 &\stackrel{i \neq j}{=} \langle s_i \rangle_0 \langle s_j \rangle_0 = \tanh(\beta\lambda)^2\end{aligned}$$

wird daraus

$$\langle H_1 \rangle_0 = -J \underbrace{N \frac{q}{2}}_{\# \text{Paare}(ij)} (\tanh(\beta\lambda))^2 + (\lambda - h)N \tanh(\beta\lambda) \quad (5.6)$$

$$F_{var}(\lambda) = N \left[-\frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh(\beta\lambda)) - J \frac{q}{2} \tanh(\beta\lambda)^2 + (\lambda - h) \tanh(\beta\lambda) \right] \quad (5.7)$$

Nun wird die freie Energie minimiert

$$\begin{aligned}0 &\stackrel{!}{=} \frac{\partial F_{var}}{\partial \lambda} \implies \\ \boxed{\lambda_{min} - h &\stackrel{!}{=} qJ \tanh(\beta\lambda_{min})} \implies \\ F_{var}(\lambda_{min}) &= -\frac{N}{\beta} \ln[2 \cosh(\beta\lambda_{min})] + \frac{N}{2qJ} (\lambda_{min} - h)^2\end{aligned} \quad (5.8)$$

Die Magnetisierung (pro Platz) ergibt sich aus der freien Energie

$$\begin{aligned}M &= -\frac{1}{N} \frac{dF_{var}}{dh} \\ &= -\frac{1}{N} \left(\frac{\partial F_{var}}{\partial h} + \underbrace{\frac{\partial F_{var}}{\partial \lambda}}_{=0 \text{ bei } \lambda_{min}} \frac{\partial \lambda}{\partial h} \right) \\ &= \frac{\lambda_{min} - h}{qJ}\end{aligned} \quad (5.9)$$

Gleichung 5.9 eingesetzt in 5.8 führt zu der

$$\begin{aligned}&\text{Mean Field Gleichung} \\ \boxed{M = \tanh[\beta(qJM + h)]}\end{aligned} \quad (5.10)$$

5.3.3 Korrelationsfunktion im Mean-Field Variations-Ansatz

Eine Skizze der Herleitung:

- Führe ortsabhängige Magnetfelder h_i ein

$$\begin{aligned}G_C(i - j) &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F}{\partial h_i \partial h_j} && \text{(siehe Kap 2)} \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle s_i \rangle}{\partial h_j}\end{aligned}$$

- Variationsansatz mit ortsabhängigen h_i und $\lambda^{(i)}$
Minimiere $F_{var}(\{\lambda^{(i)}\})$

$$\begin{aligned} \rightarrow \dots \rightarrow \lambda_{min}^{(i)} - h_i & \stackrel{!}{=} J \sum_{\text{NN von } i} \tanh(\beta \lambda_{min}^{(i)}) \\ \rightarrow \dots \rightarrow \langle s_i \rangle & = \tanh[\beta(h_i + J \sum_{j \text{ in } \langle ij \rangle} \langle s_j \rangle)] \end{aligned}$$

Dies ist ein System von gekoppelten Gleichungen

- Lösung bei kleinen h_i und nahe bei T_C
Dort sind die Magnetisierungen $\langle s_i \rangle$ klein und es folgt mit der Näherung $\tanh(x) \approx x$ ein System von linearen Gleichungen
- Lösung dieses Gleichungssystems durch Transformation in den Impulsraum
Für $T > T_C$:

$$\rightarrow \dots \rightarrow \tilde{G}_C(\vec{p}) = \frac{1}{1 - 2\beta J \underbrace{\sum_{l=1}^d \cos(p_l)}_{\text{wie } \epsilon_k}}$$

Mit der Näherung für kleine p_l (also kleine $|\vec{p}|^2$ d.h. große Abstände im Ortsraum)

$$\begin{aligned} \cos(y) & \approx 1 - \frac{y^2}{2} \\ \tilde{G}_C & \approx \frac{\xi^2}{\beta J} \underbrace{\frac{1}{1 + |\vec{p}|^2 \xi^2}}_{\text{FFT von } e^{-\tau/\xi}} \quad \text{mit } \xi^2 = \frac{\beta J}{\underbrace{1 - q\beta J}_{=0 \text{ bei } \beta_C}} \end{aligned}$$

Für $T < T_c$: ähnlich, hier aber nicht ausgeführt.

5.3.4 Kritische Exponenten im Mean Field

(Ising) Folgen aus: $M = \tanh[\beta(qJM + h)]$ mit $\beta qJ = \frac{T_c}{T}$

Bei $h = 0$

1. Kritisches Verhalten von M

$$T \rightarrow 0 : M \rightarrow \pm 1$$

$$T \rightarrow T_c : |M| \ll 1, \beta J q \approx 1$$

$$\Rightarrow \tanh(x) \approx x - \frac{x^3}{3} + \dots$$

$$M \approx \frac{T_c}{T} M - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 M^3$$

$$M = \pm \sqrt{\frac{3\left(1 - \frac{T_c}{T}\right)}{\left(\frac{T_c}{T}\right)^3}} = \pm \sqrt{3} \underbrace{\frac{T}{T_c}}_{1+t} \sqrt{\underbrace{\frac{T_c - T}{T}}_{-t}}$$

Magnetisierung im Mean Field nahe T_c :

$$M = \pm\sqrt{3}(1+t)(-t)^{\frac{1}{2}} \quad (5.11)$$

Kritischer Exponent „ β “ = $\frac{1}{2}$ (unabhängig vom Gitter!)

Korrekt:

- 1d: kein Potenzverhalten
- 2d: $\beta = \frac{1}{8}$ (Quadratgitter, exakt bekannt)
- 3d: $\beta \approx \frac{5}{16}$ (Kubisches Gitter)
- ≥ 4 d: $\beta \approx \frac{1}{2}$

2. Kritisches Verhalten von χ

Folgt aus $\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = \dots = \frac{1-M^2}{qJ(t+M^2)}$

- $T > T_c$: $M \rightarrow 0$: $\chi = \frac{1}{qJt} \propto t^{-\gamma} \Rightarrow \gamma = 1$
- $T < T_c$: $M \approx \sqrt{-3t} \Rightarrow \chi \approx \frac{1}{qJ(-2t)} \propto t^{-\gamma'} \Rightarrow \gamma' = 1$

In Mean Field $\gamma = \gamma' = 1$

Korrekt

- 1d: kein Potenzverhalten
- 2d: $\gamma = \gamma' = \frac{7}{4}$
- 3d: $\gamma = \gamma' \approx 1.24$

3. Kritisches Verhalten der spezifische Wärme c

Folgt aus $c = \frac{\partial u}{\partial T} \approx |t|^{-\alpha}$

$$E = \langle H \rangle = -J \sum_{\langle ij \rangle} \underbrace{\langle s_i \rangle \langle s_j \rangle}_{MF} = -\frac{N}{2} qJM^2$$

\Rightarrow Innere Energie pro Platz $u = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle H \rangle = -\frac{qJ}{2} M^2$

- $T > T_c$: $M \rightarrow 0$: $c = 0$
- $T < T_c$: $M \approx \sqrt{-3t}$: $c = \frac{3}{2}$

In Mean Field: Sprung in der Wärmekapazität (d.h. Phasenübergang erster Ordnung?!)

In Mean Field $\alpha = 0$

Korrekt: c ist stetig und hat Phasenübergang 2. Ordnung in $d \geq 2$

4. Kritischer Exponent der Korrelationsfunktion
aus Kapitel 5.3.3.:

$$T > T_c : \tilde{G}_c(\vec{p}) = \frac{1}{1 - 2\beta J \sum_{l=1}^D \cos(p_l)}$$

$$\vec{p} = (p_1, p_2, \dots)$$

$$|\vec{p}| \text{ klein} : \tilde{G}_c(\vec{p}) \approx \frac{\xi^2}{\beta J} \frac{1}{\underbrace{1 + |\vec{p}|^2 \xi^2}_{\mathcal{F}(e^{-\frac{r}{\xi}})}}$$

$$\xi^2 = \frac{\beta J}{1 - q\beta J} = \frac{\beta J}{1 - \frac{T_c}{T}}$$

Kritischer Exponent η :

η ist so gewählt, dass er in MF = 0.

$$G_c(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \Rightarrow \mathcal{F} \Rightarrow \tilde{G}_c(\vec{p}) \propto |\vec{p}|^{-2+\eta}$$

In Mean Field $\eta = 0$

Kritischer Exponent ν

$$\xi \propto |t|^{-\nu}$$

In Mean Field $\nu = \frac{1}{2}$

Zusammenfassung der Kritischen Exponenten des Ising Modells:

	$\frac{k_B T_c}{J}$	β	γ	α	ν	η
Mean Field	9	$\frac{1}{2} = \frac{8}{16}$	1	0 (Sprung)	$\frac{1}{2}$	0
3d Kub. Gitter $q = 6$	≈ 4.510	$\approx \frac{5}{16}$	≈ 1.24	stetig	≈ 0.63	≈ 0.04
2d Quad. Gitter $q = 4$	2.269...	$\frac{1}{8} = \frac{2}{16}$	$\frac{7}{4}$	stetig	1	$\frac{1}{4}$
1d $q = 2$	„0“	„0“	„1“	stetig	„2“	„1“

Man findet: $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ „Scaling Relation“ (exakt in $d = 2$, numerisch in $d = 3$ und auch in MF)

- MF wird besser mit zunehmender Dimension (zunehmender Koordinationszahl)
- Vermutlich exakt ab „oberer kritischen Dimension“ (= 4 bei Ising, kein Beweis)
- MF zeigt oft zu starke Ordnung, zu starke Phasenübergänge (1. Ordnung statt 2. Ordnung, 2. Ordnung statt Crossover), T_c zu hoch weil Fluktuationen vernachlässigt werden.

5.3.5 Landau Theorie

- Annahme: Die Freie Energie kann in einer Potenzreihe entwickelt werden (nicht immer korrekt).
- Berücksichtige Symmetrien des Modells.

Beispiel Ising: $h=0$ (\Rightarrow Symmetrie $M \leftrightarrow -M$)

Ansatz:

$$F = F_0 + a_2 M^2 + a_4 M^4 + \underbrace{\mathcal{O}(M^6)}_{\text{hier nicht wichtig für krit. Verhalten}} \quad (5.12)$$

(Mit Magnetfeld entwickle mit ungeraden Potenzen von M vernachlässige ab $\mathcal{O}(M^5)$).

Stabilität: $a_4 > 0$ (sonst Minimum von F bei $M \rightarrow \infty$)

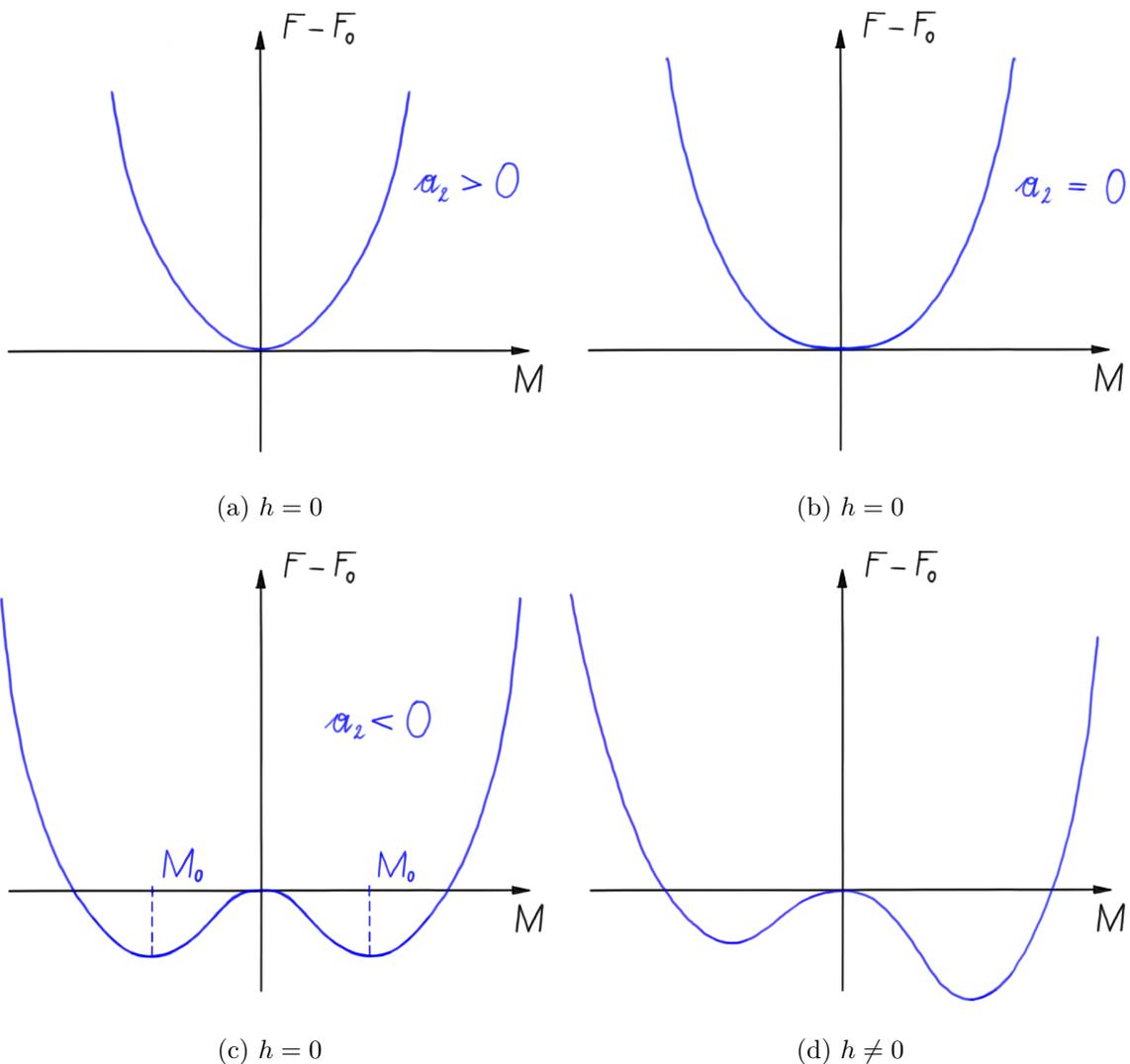


Abbildung 5.3: Freie Energie der Landau-Theorie für verschiedene Vorzeichen der Vorfaktoren.

Minimum von F bei $\pm M_0$:

- $a_2 > 0 \rightarrow M_0 = 0$

- $a_2 < 0 \rightarrow M_0 \neq 0$

=> Phasenübergang bei $a_2 = 0$. Definiere $a_2 = \tilde{a}_2 t$

5.4 Landau-Ginzburg Theorie

- Erweiterung von MF um räumliche Abhängigkeit d.h. Theorie mit Fluktuationen.
- Variable: „ $\vec{\Phi}(\vec{x})$ “ kann eine „fundamentale Variable“ sein (Higgs-Mechanismus) oder Ergebnis einer Mittelung der ursprünglichen Variable (z.B. Spins) über kleine Raumvolumina (kleiner als „Auflösungsvermögen“) (=> große Abstände in Landau-Ginzburg relevant)

Ansatz: Hamilton Dichte: $H_{LG} = \frac{1}{2}\alpha^2 |\nabla \vec{\Phi}|^2 + \frac{1}{2}\mu^2 |\vec{\Phi}|^2 + \frac{1}{4}\lambda |\vec{\Phi}|^4 - \vec{h} \vec{\Phi}$

$$Z_{LG} = \underbrace{\int \mathcal{D}\vec{\Phi}}_{\text{ähnlich wie Pfadintegral}} e^{-\int d^3x \beta H_{LG}(\vec{\Phi})}$$

$\alpha \dots$ charakteristische Länge

$\mu^2 \dots$ bestimmt Phase analog a_2 bei Landau-Theorie (darf auch negativ sein)

$\lambda > 0 \dots$ für Stabilität

Landau-Theorie bekommt man bei räumlich konst. $\vec{\Phi} \Rightarrow |\nabla \vec{\Phi}|^2 = 0$.

-> $Z_L(\Phi_0) = e^{-\int d^3x \beta H_{LG}(\Phi_0)}$ mit $\Phi_0^2 = |\vec{\Phi}|^2$

Beispiel für LG:

- Supraleitung
- Higgs-Mechanismus

6 Reihenentwicklungen

6.1 Tieftemperaturentwicklung des Ising Modells

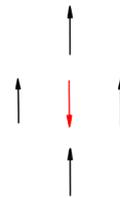
$$\frac{k_b T}{J} \ll 1 \iff \beta J \gg 1$$

$h > 0$:

- Zustand mit tiefster Energie:
Zustand: alle Spins = ± 1 .
 $H = E_0 = -J \sum_{\langle ij \rangle} 1 \cdot 1 - h \sum_i 1$

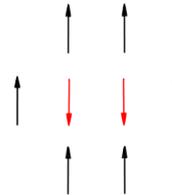
- Kleinste Anregung aus dem (ferromagnetischen) Grundzustand:

Einzelne Spin mit Wert -1.
Energieänderung: $\Delta E = qJ + 2h$



- Nächst kleinste Anregung aus dem (ferromagnetischen) Grundzustand:

2 benachbarte Spins drehen.
Energieänderung: $\Delta E = 2(q-1)J + 4h$



Aus diesen Überlegungen ergibt sich die Zustandssumme wie folgt.

$$Z = e^{-\beta E_0} \cdot \left(1 + \underbrace{N n^q w}_{\substack{1 \text{ umgekehrter} \\ \text{Spin}}} + \underbrace{N \frac{q}{2} n^{2q-2} w^2}_{\substack{2 \text{ benachbarte} \\ \text{Spins} \\ \text{umgekehrt}}} + \underbrace{\frac{N(N-q-1)}{2} n^{2q} w^2}_{\substack{2 \text{ nicht benachbarte} \\ \text{Spins} \\ \text{umgekehrt}}} + \mathcal{O} \right) \quad (6.1)$$

mit $n = e^{-2\beta J}$ und $w = e^{-2\beta h}$.

Dies entspricht einer Potenzreihe in n und w . Diese Entwicklung ist zulässig für tiefe Temperaturen $\beta \gg 1$ bzw. kleinem Magnetfeld.

6.2 Hochtemperatur-Darstellung

Die Zustandssumme des Ising-Modells kann folgendermaßen umgeschrieben werden:

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j} \quad (6.2)$$

$$e^{\beta J s_i s_j} = \cosh(\beta J) \left(1 + s_i s_j \underbrace{\tanh(\beta J)}_{:= v} \right) \quad (6.3)$$

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} \cosh(\beta J) (1 + v s_i s_j) \quad (6.4)$$

$$= \cosh(\beta J)^{N \frac{q}{2}} \sum_{\{s_i\}} \left(1 + v \sum_{\langle nm \rangle} s_n s_m + v^2 \sum_{\substack{\langle nm \rangle \\ \neq \langle lk \rangle}} s_n s_m s_l s_k + \dots \right) \quad (6.5)$$

Dies scheint auf den ersten Blick deutlich komplizierter als der ursprüngliche Ausdruck der Zustandssumme, kann jedoch mittels der Summe $\sum_{\{s_i\}}$ deutlich vereinfacht werden.

Betrachte $\mathcal{O}(v)$. Das Produkt $s_n s_m$ kann lediglich die Werte ± 1 annehmen und über alle 4 Konfigurationsmöglichkeiten von s_n und s_m wird summiert:

$$v \sum_{\langle nm \rangle} \sum_{\{s_i\}} s_n s_m = v \sum_{\langle nm \rangle} (1 - 1 + 1 - 1) = 0 \quad (6.6)$$

Ähnlich für $\mathcal{O}(v^2)$:

$$v^2 \sum_{\langle nm \rangle} \sum_{\substack{\{s_i\} \\ \neq \langle lk \rangle}} \underbrace{s_n}_{\pm 1} s_m s_l s_k = 0 \quad (6.7)$$

Für jeden Term mit $s_n = +1$ gibt es einen identischen Term mit $s_n = -1$: Die Summe verschwindet daher.

Die einzige Möglichkeit für einen nichtverschwindenden Beitrag ist, wenn Indizes gleich sind (z.B: $n = l$): Denn dann ergibt sich s^2 und der Term ist bei beiden Vorzeichen von s positiv. Dies muss für alle Indizes erfüllt sein: Beiträge ergeben sich daher nur wenn alle Spins in gerade Ordnung (s_n^2, s_n^4, \dots) vorkommen.

Die Summe lässt sich grafisch darstellen, mit einer Linie für jedes Paar $s_n s_m$. Der erste nichtverschwindende Beitrag ergibt sich für v^4 (Abb. 6.3):

$$v^4 \sum_{\{s_i\}} (s_1 s_2)(s_2 s_3)(s_3 s_4)(s_4 s_1) = v^4 \sum_{\{s_i\}} s_1^2 s_2^2 s_3^2 s_4^2 = v^4 \sum_{\{s_i\}} 1 = 2^N v^4 \quad (6.8)$$

Andere Beispiele für verschwindende und nicht-verschwindende Beiträge sind in Abb. 6.2.

Wie in Glg. 6.8 ersichtlich ist, liefert jeder geschlossene Graph einen Beitrag zur Zustandssumme. Die Summation über die Spins ergibt stets 2^N , die Ordnung ist $v^{|G|}$ wobei $|G|$ die Länge des Graphen ist. Die volle Zustandssumme lässt sich daher schreiben als:

$$Z = \cosh(\beta J)^{N \frac{q}{2}} 2^N \sum_{\substack{\text{Graphen} \\ \text{ohne Rand}}} v^{|G|} \quad (6.9)$$

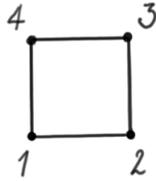


Abbildung 6.1: Erster nichtverschwindender Beitrag zur Hochtemperaturdarstellung bei 2D-Ising mit $q = 4$: Ordnung v^4 .

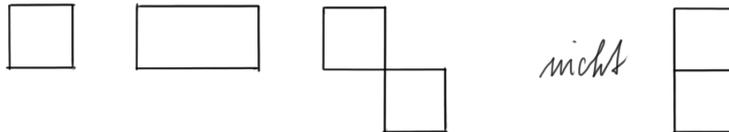


Abbildung 6.2: Die ersten Beiträge weisen keine offenen Enden auf: Sie liefern Beiträge zur HT-Darstellung. Der letzte Graph hat zwei offenen Enden: Die beiden Spins in der Mitte sind s^3 , der Term ist 0.

Dies ist eine neue Darstellung des Ising-Modells in nächsten Nachbar Paaren $\langle nm \rangle$. Sie ist bis hier exakt, kann aber zur Näherung für hohe Temperaturen verwendet werden, da $v = \tanh \beta J$ klein wird für $T \rightarrow \infty$ und die Reihe bei einer gewählten Ordnung in v (und damit maximaler Länge der Graphen) abgebrochen werden kann.

Sie ähnelt der FK-Darstellung, hat jedoch eine gänzlich andere Struktur:

- FK: $Z \approx \sum (...) \#g_{ij}=1 \ 2^{\#Cluster}$
- HT: $Z \approx \sum v^{\#Bonds \text{ im Graphen}}$

6.2.1 Erwartungswert der inneren Energie

Die innere Energie kann über eine Ableitung der Zustandssumme gewonnen werden.

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \\ \ln Z &= \frac{Nq}{2} \ln \cosh \beta J + N \ln 2 + \ln \sum_G v^{|G|} \\ \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} &= \frac{Nq}{2} \underbrace{\frac{1}{\cosh \beta J} J \sinh \beta J}_{J \tanh \beta J} + \frac{1}{\sum v^{|G|}} \sum \left(|G| v^{|G|-1} \frac{J}{\cosh \beta J^2} \right) \\ &= \frac{Nq}{2} J v + \frac{1}{v \cosh \beta J^2} \underbrace{\frac{\sum_G |G| v^{|G|}}{\sum_G v^{|G|}}}_{\langle |G| \rangle} \\ \langle E \rangle &= -\frac{NqJv}{2} - \frac{J}{v \cosh \beta J^2} \langle |G| \rangle \end{aligned}$$

6.2.2 Korrelationsfunktion in Hochtemperaturdarstellung

$$G(i, j) = \langle s_i s_j \rangle = \frac{\sum_{\{s_n\}} s_i s_j e^{-\beta H}}{\sum_{\{s_n\}} e^{-\beta H}} \quad (6.10)$$

Ähnliche Überlegungen wie bei der Herleitung der Zustandssumme gelten auch hier, es ergibt sich:

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z} \cosh(\beta J)^{N \frac{q}{2}} \sum_{\{s\}} s_i s_j \left(1 + v \sum_{\langle nm \rangle} s_n s_m + v^2 \sum_{\substack{\langle nm \rangle \\ \neq \langle lk \rangle}} s_n s_m s_l s_k + \dots \right) \quad (6.11)$$

Auch hier gilt wieder, dass nur Terme mit geraden Potenzen von s beitragen, alle anderen mitteln sich zu 0. Da nun aber die Indizes i und j vorgegeben sind, müssen diese zwangsweise den Rand eines Graphen bilden. Ein beispielhafter Beitrag zu $G(i, j)$ ist in Abb. 6.3 zu sehen.

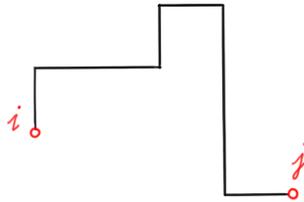


Abbildung 6.3: Nichtverschwindender Beitrag zur Korrelationsfunktion zwischen den Plätzen i und j : Die Punkte müssen am Rand des Graphen liegen.

6.2.3 Lösung des Ising-Modell in 1D

Mittels der Hochtemperaturdarstellung kann sofort die Lösung des Ising-Modells in $d=1$ gefunden werden. Bei p.b.c. gibt es lediglich 2 mögliche Graphen: keine Paare (v^0) oder alle Paare (v^N). Die Zustandssumme ist dann gemäß Glg. 6.9:

$$Z = \cosh^N(\beta J) 2^N (1 + v^N) = 2^N \left(\cosh^N(\beta J) + \sinh^N(\beta J) \right) \quad (6.12)$$

Bei offenen Randbedingungen gibt es lediglich die Möglichkeit, dass keine Paare existieren:

$$Z = \cosh^N(\beta J) 2^N \quad (6.13)$$

Da $|v| = |\tanh| < 1$ verschwindet der Term v^N im thermodynamischen Limes. Die Zustandssumme (und damit die freie Energie $F = -\frac{1}{\beta} \log Z$) ist für obc und pbc identisch: Randeffekte sind irrelevant für genügend große Systeme.

6.3 Dualitätstransformation

Die Dualitätstransformation gibt es in vielen Varianten, hier wird sie für das 2d-Ising-Modell gezeigt. Um eine solche Transformation definieren zu können, muss es ein Objekt (z.B. Punkt, Kante, etc.) des Gitters geben, welches beim Übergang zum dualen Gitter in sich selbst übergeht, siehe Tabelle 6.1. Beispiele sind die Gitterkante im 2d-Quadratgitter und eine Plakette des 4d hyperkubischen Gitters.

Tabelle 6.1: Übergang Gitter \leftrightarrow Duales Gitter

	Ursprüngliches Gitter		Duales Gitter
2d Quadratgitter	Plaketten	\leftrightarrow	Punkt
	Kante	\leftrightarrow	Kante
	Punkt	\leftrightarrow	Plakette
3d kubisch	Würfel	\leftrightarrow	Punkt
	Plakette	\leftrightarrow	Kante
	Kante	\leftrightarrow	Plakette
	Punkt	\leftrightarrow	Würfel

6.3.1 Ising-Modell auf dem Quadratgitter ($h=0$)

In der HT-Darstellung ist die Zustandssumme Z gegeben durch die Summe über alle Graphen G ohne Rand ($\partial G = \emptyset$). In zwei Dimensionen bilden die Graphen Ränder von Regionen des dualen Gitters¹.

Deswegen kann man die Graphen auch auffassen als die Ränder von Clustern einer Tieftemperatur-Entwicklung des Ising-Modells auf dem dualen Gitter. Da das duale Gitter ebenfalls ein 2D-Quadratgitter ist, beschreiben beide Darstellungen das selbe Modell.

HT-Darstellung:

Jede Kante des Graphen G trägt ein Gewicht $\tanh(\beta J)$

TT-Darstellung:

$$s_i s_j = \left\{ \begin{array}{l} 1, s_i = s_j \rightarrow \text{innerhalb eines Clusters} \\ -1, s_i \neq s_j \rightarrow \text{am Rand} \end{array} \right\} = 1 - 2\delta(\text{i,j auf Rand})$$

$$Z(\beta') \propto e^{\beta' J \frac{Nq}{2}} \left(e^{-2\beta' J} \right)^{\#\text{Rand-Bonds}}$$

Die Anzahl der Rand-Bonds ist gleich der Länge des Graphen.

Das relative Gewicht eines Graphen ist in beiden Darstellungen gleich, wenn gilt:

$$\boxed{\tanh(\beta J) = e^{-2\beta' J}} \tag{6.14}$$

Die Äquivalenz des Ising-Modells bei β (z.B. β klein \rightarrow HT) und β' (z.B. β' groß \rightarrow TT) bezeichnet man als **Dualität**.

Aus der Annahme, dass es nur eine kritische Temperatur $T_c = 1/\beta_c$ gibt (nur ein einziger

¹auf unendlich großen Systemen oder bei offenen Randbedingungen (obc)

Phasenübergang), folgt, dass die untere Grenze der HT-Phase mit der oberen Phasengrenze der TT-Phase zusammenfällt und man schreiben kann:

$$\begin{aligned}\beta_c J &= \beta'_c J \\ \Leftrightarrow \tanh(\beta_c J) &= e^{-2\beta_c J} \\ \boxed{\Leftrightarrow \sinh(2\beta_c J) = 1} & \qquad (6.15) \\ \Rightarrow \beta_c J &= \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1) \approx 0.44068679\end{aligned}$$

7 Transfermatrix

Dieses Kapitel führt die Transfermatrix am Beispiel des 1d-Isingmodells ein:

$$H = -J \sum_{i=2}^N s_{i-1} s_i$$

obc
pbc

7.1 Direkte Lösung bei $h=0$ und obc

Zustandssumme: Lässt sich mithilfe einer Rekursionsformel finden:

$$\begin{aligned}
 Z_N &= \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H} = \underbrace{\sum_{\{s_i, i < N\}} e^{\beta J \sum_{i=2}^{N-1} s_{i-1} s_i}}_{Z_{N-1}} \underbrace{\sum_{s_N} e^{\beta J s_{N-1} s_N}}_{\sum_{s_{N-1} s_N} \text{unabh. von } s_{N-1}} \\
 Z_N &= 2 \cosh(\beta J) Z_{N-1} \stackrel{\text{Rekursion}}{=} (2 \cosh(\beta J))^{N-1} Z_1 \\
 \boxed{Z_N} &= \boxed{2^N \cosh(\beta J)^{N-1}} \tag{7.1}
 \end{aligned}$$

Korrelationen: Für $h = 0$ kann man sich eines Tricks bedienen¹ und variable Kopplungen J_i einführen:

$$H = \sum_{i=2}^N J_i s_{i-1} s_i \implies Z_N = 2 \prod_{i=2}^N (2 \cosh(\beta J_i))$$

$$\begin{aligned}
 \langle s_m s_n \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_m s_n e^{-\beta H} = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} \overbrace{(s_m s_{m+1})}^{=1} \overbrace{(s_{m+1} \cdots s_{n-1})}^{=1} (s_{n-1} s_n) e^{-\beta H} \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} \frac{\partial}{\partial \beta J_{m+1}} \frac{\partial}{\partial \beta J_{m+2}} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta J_n} e^{-\beta H} \rightarrow \text{Ableitungen vertauschen mit Summe!} \\
 &= \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta J_{m+1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta J_n} Z = \prod_{k=m+1}^n \tanh(\beta J_k) \tag{7.2}
 \end{aligned}$$

Zum Schluss stellt man die Isotropie des Systems wieder her, indem man alle $J_i = J$ setzt. Damit ergibt sich für zwei Spins im Abstand r :

$$\langle s_m s_{m+r} \rangle = (\tanh(\beta J))^r = (e^{-1/\xi})^r \tag{7.3}$$

$$\xi = \frac{1}{\ln(\tanh(\beta J))} \tag{7.4}$$

¹Im Allgemeinen so nicht möglich

Bei großem β verhält sich die Korrelationslänge wie:

$$\xi \approx \frac{1}{2} e^{2\beta J}$$

divergiert also exponentiell in β für $\beta \rightarrow \infty$ und nicht, wie in höheren Dimensionen, potenzartig. Das 1d-Isingmodell hat somit eine Art "Phasenübergang" bei $T = 0$, jedoch mit exponentiellen Abhängigkeiten von $\beta \rightarrow$ "Phasengrenze".

7.2 Zustandssumme via Transfermatrix

Unter Beachtung der Periodizität ($s_{N+1} = s_1$) kann man die Zustandssumme schreiben als:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + \beta h \sum s_i} \quad (7.5)$$

Was man in nächste Nachbar-Paare $\langle ij \rangle$ umschreiben kann:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1}^N V(s_i, s_{i+1}) = \sum_{\{s_i\}} V(s_1, s_2) V(s_2, s_3) \cdots V(s_N, \overbrace{s_{N+1}}{\equiv s_1}) \quad (7.6)$$

$$\text{mit } V(s, s') = e^{\beta J s s' + \frac{1}{2} h (s + s')} \rightarrow \text{"Transfermatrix"}$$

(7.7)

$$V = \begin{bmatrix} V(+, +) & V(+, -) \\ V(-, +) & V(-, -) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{\beta J + \beta h} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta h} \end{bmatrix} \rightarrow \text{symmetrisch}$$

Die Summen über s_2, s_3, \dots lassen sich als Matrixmultiplikationen der einzelnen Transfermatrizen $V(s, s')$ auffassen und die Summe über Spin $s_1 \equiv s_{N+1}$ ist nichts anderes als die Spur über das Produkt aller Matrizen. Da die Matrix V unabhängig von den einzelnen Spins s, s' ist, erhält man für die Zustandssumme:

$$Z_N = \text{Tr}(V^N) \quad (7.8)$$

N.B. Analogien zur Transfermatrix:

1. **Quantenmechanik:** $Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \text{Tr} \left(\underbrace{\left(e^{-\frac{\beta \hat{H}}{M}} \right)^M}_{\text{Transfermatrix in der imaginären Zeit}} \right)$
2. **Markov Chain Monte Carlo (MCMC):** Markov-Matrix P , welche so konstruiert ist, dass $\pi_0 P^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \pi$, mit π der gewünschten Verteilung, sowie $\pi P = \pi$ (Stationarität). Die Matrix P beschreibt hier „Transport“ in räumlicher Richtung

7.2.1 Berechnung von Z_N über Diagonalisierung von V

Da die Transfermatrix V symmetrisch ist, können die Eigenvektoren diagonal gewählt werden und man kann V zerlegen:

$$V = \underbrace{Q \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 \end{pmatrix} Q^{-1}}_{:=\Lambda} \quad \text{mit } Q = (\vec{x}_0, \vec{x}_1) \quad (\text{Eigenvektoren } \vec{x}_0, \vec{x}_1 \text{ als Spalten})$$

$$\text{Tr}(V^N) = \text{Tr}(Q \Lambda Q^{-1} Q \cdots \Lambda Q^{-1}) \stackrel{\text{zyklisch vertauschen}}{=} \text{Tr}(\Lambda^N) = \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_0^N & 0 \\ 0 & \lambda_1^N \end{pmatrix}$$

$$Z_N = \lambda_0^N + \lambda_1^N$$

(7.9)

Allgemein (für andere Modelle) findet man:

$$Z_N = \sum_i \lambda_i^N \quad (7.10)$$

Für das betrachtete 1d-Ising-Modell erhält für die Eigenwerte λ :

$$\lambda_{0,1} = e^{\beta J} \cosh(\beta J) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \quad (7.11)$$

mit Magnetfeld ($h \neq 0$), bzw.

$$\lambda_{0,1} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J} \quad (7.12)$$

ohne Magnetfeld.

7.3 Thermodynamik mittels Transfermatrix

Wie im Kapitel 7.2.1 gezeigt lässt sich die Zustandssumme über die Eigenwerte λ der Transfermatrix schreiben:

$$Z_N = \sum_i \lambda_i^N \quad (7.13)$$

Sortiert man die Eigenwerte der Größe nach und zieht den größten Eigenwert λ_0 heraus, ergibt sich

$$Z_N = \lambda_0^N \left(1 + \sum_{i>0} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^N \right) \quad (7.14)$$

Im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$) verbleibt nur mehr der größte Eigenwert, alle Terme der Summe gehen gegen 0. Im folgenden werden einige Größen des 1D-Ising-Modells berechnet.

7.3.1 Freie Energie

Für die freie Energie pro Platz f gilt damit:

$$f = -\frac{1}{N\beta} \log Z = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_0 \quad (7.15)$$

Alle thermodynamischen Größen hängen von der freien Energie (oder deren Ableitungen) ab. Damit ist die gesamte Thermodynamik des Systems vollständig durch den größten Eigenwert λ_0 und dessen Abhängigkeit von T , h , etc. bestimmt.

7.3.2 Magnetisierung

Die Magnetisierung (pro Platz) ist gegeben durch $M = -\frac{\partial}{\partial h} f(h, T)$. Kurze Rechnung ergibt damit für das Ising-Modell in 1D:

$$M = \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \quad (7.16)$$

Für $h \rightarrow 0$ geht auch die Magnetisierung gegen 0. Das Ising-Modell in 1D zeigt daher (auch im thermodynamischen Limes) keine spontane Magnetisierung.

7.3.3 Suszeptibilität

Die Suszeptibilität ist gegeben durch $\chi = \frac{\partial M}{\partial h}$. Für $h = 0$ ergibt sich

$$\chi = e^{2\beta J} \quad (7.17)$$

Für $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) divergiert die Suszeptibilität daher exponentiell.

7.3.4 Innere Energie

Die innere Energie ist gegeben durch

$$u = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f) \quad (7.18)$$

Für $h = 0$ ergibt sich

$$u = -J \tanh \beta J \quad (7.19)$$

7.3.5 Spezifische Wärme

Für die spezifische Wärme bei $h = 0$ ergibt sich:

$$c = \frac{\partial u}{\partial T} = k_B (\beta J)^2 (1 - \tanh^2 \beta J) \quad (7.20)$$

Für $T \rightarrow 0$ ergibt eine Entwicklung:

$$c \approx (\beta J)^2 e^{-2\beta J} \quad (7.21)$$

Die Wärmekapazität geht also für $T \rightarrow 0$ exponentiell gegen 0.

7.4 Korrelationsfunktionen mittels Transfermatrix

Gesucht ist die verbundene Korrelationsfunktion:

$$G = \langle A_0 B_R \rangle - \langle A_0 \rangle \langle B_R \rangle \quad (7.22)$$

Die folgende Rechnung (räumliche Korrelationsfunktionen im klassischen Modell) weist starke Ähnlichkeiten zur Berechnung von Greensfunktionen in quantenmechanischen Modellen (Lehmann-Darstellung) auf. Dies liegt an der ähnlichen Struktur der Zustandssumme. Klassisch mit Transfermatrix V :

$$Z_N = \text{tr } V^N \quad (7.23)$$

Quantenmechanik nach Zerlegung in imaginäre Zeitschritte:

$$Z = \text{tr } e^{-\beta H} = \text{tr} \left(e^{-\frac{\beta}{N} H} \right)^N \quad (7.24)$$

7.4.1 Einplatz-Operator in Transfermatrix

Für den Erwartungswert eines lokalen Operators A (z.B. $A = S_0$) gilt:

$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr} AV^N}{\text{tr} V^N} \quad (7.25)$$

Mittels der Spektraldarstellung von V

$$V = \sum_i \lambda_i |v_i\rangle \langle v_i| \quad (7.26)$$

ergibt sich:

$$\langle A_0 \rangle = \frac{1}{\sum_k \lambda_k^N} \sum_j \langle v_j | A_0 \left(\sum_{i_1} \lambda_{i_1} |v_{i_1}\rangle \langle v_{i_1}| \right) \left(\sum_{i_2} \lambda_{i_2} |v_{i_2}\rangle \langle v_{i_2}| \right) \dots |v_j\rangle \quad (7.27)$$

$$= \frac{1}{\sum_k \lambda_k^N} \sum_j \langle v_j | A_0 | v_j \rangle \lambda_j^N \quad (7.28)$$

$$= \frac{1}{\sum_k \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0}\right)^N} \sum_j \langle v_j | A_0 | v_j \rangle \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0}\right)^N \quad (7.29)$$

Im thermodynamischen Limes verbleibt wiederum nur der größte Eigenwert und es ergibt sich:

$$\boxed{\langle A_0 \rangle = \langle v_0 | A_0 | v_0 \rangle} \quad (7.30)$$

7.4.2 Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion in Transfermatrix

Analog ergibt sich für zwei Operatoren A , B an den Plätzen 0 und R mittels Einsetzen der Spektraldarstellung von V :

$$\langle A_0 B_R \rangle = \frac{1}{\text{tr} V^N} \text{tr} \left(A_0 V^R B_R V^{N-R} \right) \quad (7.31)$$

$$= \frac{1}{\sum_k \lambda_k^N} \sum_j \sum_{i_1 \dots i_k} \sum_{k_1 \dots k_{N-R}} \lambda_j^N \langle v_j | A_0 | v_{i_1} \rangle \langle v_{i_1} | v_{i_2} \rangle \dots \langle v_{i_R} | B_R | v_{k_1} \rangle \langle v_{k_1} | \dots | v_j \rangle \quad (7.32)$$

$$= \frac{1}{\sum_k \lambda_k^N} \sum_{ij} \langle v_j | A_0 | v_i \rangle \langle v_i | B_R | v_j \rangle \lambda_i^R \lambda_j^{N-R} \quad (7.33)$$

Im thermodynamischen Limes verbleibt nur der Term $j = 0$ und es ergibt sich

$$\langle A_0 B_R \rangle = \sum_i \langle v_0 | A_0 | v_i \rangle \langle v_i | B_R | v_0 \rangle \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0}\right)^R \quad (7.34)$$

Der Summand mit $i = 0$ ergibt $\langle A \rangle \langle B_R \rangle$, wodurch sich die verbundene Korrelationsfunktion G schreiben lässt als:

$$\boxed{G = \langle A_0 B_R \rangle - \langle A_0 \rangle \langle B_R \rangle = \sum_{i>0} \langle v_0 | A_0 | v_i \rangle \langle v_i | B_R | v_0 \rangle \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0}\right)^R} \quad (7.35)$$

Für den Spezialfall $B = A^\dagger$ wird aus Glg. 7.35:

$$G_{A,A^\dagger} = \sum_{i>0} |\langle v_0 | A | v_i \rangle|^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^R \quad (7.36)$$

$$= \sum_{i>0} c_i e^{-\frac{R}{\xi_i}} \quad (7.37)$$

Die verbundene Korrelationsfunktion ist damit eine Summe von abfallenden Exponentialfunktionen mit Korrelationslängen:

$$\xi_i = \frac{1}{\log \frac{\lambda_0}{\lambda_i}} \quad (7.38)$$

Die größte Längenskala/Korrelationslänge ist daher

$$\boxed{\xi = \frac{1}{\log \frac{\lambda_0}{\lambda_1}}} \quad (7.39)$$

Die Korrelationslänge ist damit bestimmt durch das Verhältnis des größten und zweitgrößten Eigenwerts. Ähnliches (größter und zweitgrößter Eigenwert) ergibt sich bei:

- Quantenmechanik: Gap-Energie zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand
- Markov-Ketten: Autokorrelationszeiten sind durch zweitgrößten Eigenwert der Markov-Matrix bestimmt

Für das Beispiel des 1D-Ising-Modells ergibt sich für die Eigenvektoren von V :

$$v_0 = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} \quad v_1 = \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ -\cos \varphi \end{pmatrix} \quad (7.40)$$

mit

$$\varphi = e^{2\beta J} \sinh \beta h \quad (7.41)$$

Damit ergibt sich für die Spin-Spin-Korrelationen:

$$\langle S_0 S_R \rangle \stackrel{N \rightarrow \infty}{\cong} \cos^2(2\varphi) + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^R \sin^2(2\varphi) \quad (7.42)$$

$$G = \langle S_0 S_R \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_R \rangle = (\tanh(\beta J))^R \sin^2(2\varphi) \quad (7.43)$$

Zusammenfassend: Die gesamte Thermodynamik steckt im größten Eigenwert λ_0 , die Korrelationen stecken im zweitgrößten Eigenwert λ_1 .

7.4.3 „Kritische Exponenten des 1D-Ising-Modells“

Für $T \rightarrow 0$ zeigen alle Größen eine exponentielle Abhängigkeit (statt einem potenzartigem Verhalten). Um dennoch kritische Exponenten zu bestimmen, kann man (statt $t = \frac{T-T_c}{T_c}$) definieren

$$t := e^{-2\beta J} \quad (7.44)$$

und damit das exponentielle Verhalten in die Definition von t stecken. Es folgt damit:

$$\chi \propto e^{2\beta J} \stackrel{!}{=} t^{-\gamma} \quad \Rightarrow \gamma = 1 \quad (7.45)$$

$$\xi \propto e^{2\beta J} \stackrel{!}{=} t^{-\nu} \quad \Rightarrow \nu = 1 \quad (7.46)$$

7.5 Verallgemeinerung von Transfermatrizen für „2D“-Systeme

Fasse ein System der Größe $N \times M$ - mit q Freiheitsgraden pro Platz - als eine Kette von M Untersystemen der Größe $N \times 1$ auf. Jedes Untersystem hat dann $q \cdot N$ Freiheitsgrade. Die Transfermatrix hat dann statt $[q \times q]$ die Größe $[q^N \times q^N]$, der Aufwand steigt daher exponentiell mit der Breite des Systems.

Dieser Ansatz eignet sich besonders um Systeme zu simulieren, die schmal aber sehr lang sind ($M \gg N$). Der thermodynamische Limes kann lediglich für $M \rightarrow \infty$ erreicht werden, nicht jedoch für N . Für die Thermodynamik ist lediglich der größte Eigenwert von V relevant welcher somit effizient (z.B. mittels Lanczos-Verfahren) berechnet werden kann.

8 Renormierungsgruppe

Fragestellung:

- Warum gibt es Universalität und Universalitätsklassen?
- Warum gibt es Beziehungen zwischen den kritischen Exponenten
„Skaling Thermodynamische Ungleichungen“: tatsächlich Gleichungen

Antworten darauf und analytische Zugänge zu komplizierteren Systemen aus der „Renormierungsgruppe“ (RG): K.G. Wilson 1971.

Allgemeine Idee:

- Ändere Iterativ die Längenskala auf der man ein System betrachtet durch Entfernung von Freiheitsgraden
- Beschreiben mittels einer effektiven Hamilton-Funktion
- Am kritischen Punkt ($\xi = \infty$) bleiben physikalische Eigenschaften bei der Transformation erhalten => Fixpunkt der RG-Transformation

8.1 RG-Transformation

(hier: eine Variante im Ortsraum)

Reduziere die Anzahl der Freiheitsgrade $N \rightarrow N'$: „Skalen Faktor“ $b^d = \frac{N}{N'}$ oder fasse jeweils 3×3 Plätze zu einem neuen Platz zusammen ($b = 3$).

Neue Spin-Konfiguration: neue Freiheitsgrade sollen dieselbe Anzahl von Werten haben (Ising: 2 Werte).

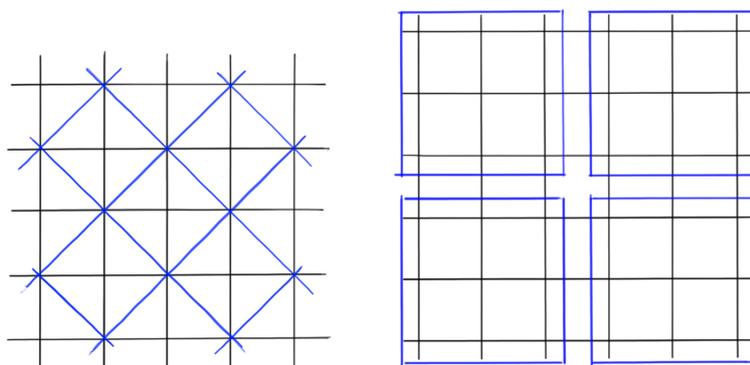


Abbildung 8.1: Möglichkeiten zur Reduktion der Freiheitsgrade

Wertzuweisung: z.B. Majoritätsentscheidung: 3×3 Spins $\rightarrow s'$ oder „Integration“ über die Weggelassenen Freiheitsgrade (z.B. im Impulsraum: integriere über hohe Impulse).

Forderung: Zustandssumme soll dem Wert nach gleich bleiben. Die neuen Freiheitsgrade wechselwirken mit einer neuen Hamiltonfunktion.

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\mathcal{H}} = \sum_{\{s'\}} e^{-\mathcal{H}'} = Z'$$

(im ersten Schritt: $\mathcal{H} = \beta H$)

s ... alte Freiheitsgrade

s' ... neue (weniger) Freiheitsgrade

Dies definiert eine Abbildung $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}' = R\mathcal{H}$

R ... Transformation

Skalierungen

- Freie Energie pro Spin: $f'(\mathcal{H}') = b^d f(\mathcal{H})$
- Längenskalen: $r \rightarrow r' = \frac{1}{b}r$
speziell $\xi \rightarrow \xi' = \frac{1}{b}\xi$
- Impulse $p \rightarrow p' = bp$
- Man findet, dass Spins ebenfalls reskaliert werden sollten: $s_r \rightarrow s'_{r'} = \frac{1}{c}s_{r'}$
Dann gilt $G(\vec{r}, \mathcal{H}) = c^2 G(\vec{r}', \mathcal{H}')$

Fixpunkt:

$\xi' = \frac{1}{b}\xi < \xi$ außer $\xi = 0$ oder ∞

Am Fixpunkt gilt: $\mathcal{H} = \mathcal{H}' = \mathcal{H}^*$ (nur bei unendlich großen Systemen)

Beispiele:

- $T = \infty$: völlig ungeordnetes System $\xi = 0$
- $T = 0$: meist völlig geordnetes System. Bei $h > 0$ ist $\langle s_i \rangle = 1$, daher gilt: $\xi = 0$, da verbundene Korrelationsfunktion $G = \langle s_0 s_r \rangle - \langle s_0 \rangle \langle s_r \rangle \approx e^{-\frac{r}{\xi}}$
- $T = T_c$: $\xi = \infty$

8.2 RG-Fluss im Parameterraum

In der folgenden Herleitung gibt es Inkonsistenzen zwischen h und βh .

\mathcal{H} ist eine Summe von Funktionen von (eventuell vielen) Spins. Schar aller solcher Funktionen sei $\{f_\alpha\}$ oder \vec{f} .

Beispiele: $f_{(1)}(s_i) = s_i$, $f_{(2)}(s_i, s_j) = s_i s_j$, ...

zusätzliche Parameter (wie h , J_{ij}): $\vec{\mu}$

d.h. $\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} f_{\alpha} = \vec{\mu} \vec{f}$

Die RG-Transformation vergrößert meist sehr schnell die Zahl der (von Null verschiedenen) Parameter (\rightarrow später).

RG-Transformation:

$\mathcal{H}' = R(\mathcal{H})$ und $\mathcal{H} = \vec{\mu} \vec{f}$

und somit:

$$\vec{\mu}' = R(\mu) \iff \mathcal{H}' = \vec{\mu}' \vec{f}'$$

Am Fixpunkt gilt: $\vec{\mu} = \vec{\mu}' = \vec{\mu}^*$

In der Nähe des Fixpunktes (versuche) Linearisierung (manchmal sind höhere Ordnungen nötig)

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu} & (\delta\vec{\mu}.. \text{ kleine Abweichung vom Fixpunkt}) \\ \vec{\mu}' &= \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu}' \end{aligned}$$

Linearisierung: $\delta\vec{\mu}' = A(\vec{\mu}^*)\delta\vec{\mu}$

mit der RG-Matrix $A(\vec{\mu}^*)$ mit Eigenwerten λ_i und Eigenfunktionen v_i .

Iteration von RG-Transformationen:

$$\delta\vec{\mu}'' = A_{b_2}\delta\vec{\mu}' = \underbrace{A_{b_2}A_{b_1}}_{A_{b_1b_2}}\delta\vec{\mu} \quad (8.1)$$

$A_{b_1b_2}$ ist die RG-Transformation mit Skalenfaktor $b_1 \cdot b_2$. Daraus folgt die folgende Gruppeneigenschaft (daher Renormierungsgruppe):

$$\lambda(b_2) \cdot \lambda(b_1) = \lambda(b_1 \cdot b_2) \quad (8.2)$$

Betrachte den Fall, dass Skalenfaktoren b kontinuierliche Werte annehmen (z.B. Impulsraum-Skala), dann folgt die Lösung

$$\boxed{\lambda_i = b^{y_i}} \quad (8.3)$$

mit "kritischen Exponenten" y_i .

Darstellung in der Eigenbasis von A:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \sum_i g_i \vec{v}_i \quad \vec{\mu}' = \vec{\mu}^* + \sum_i g'_i \vec{v}_i \quad (8.4)$$

$$\Rightarrow g'_i = \lambda_i g_i \quad \Rightarrow \boxed{g'_i = b^{y_i} g_i} \quad (8.5)$$

Dabei bezeichnet g_i den Abstand vom Fixpunkt in Richtung des Eigenvektors \vec{v}_i . Es gilt $b > 1$.

Fallunterscheidung:

$y_i > 0$: g_i *wächst* bei der RG-Transformation, d.h. das System entfernt sich vom Fixpunkt in Richtung \vec{v}_i , außer wenn $g_i = 0$. Man spricht von einer "relevanten Variablen" g_i . Eine solche muss passend eingestellt werden, damit man zum Fixpunkt kommt. Beispiele: Im Ising-Modell sind Magnetfeld ($h = 0$) und Temperatur ($T = T_c$) relevante Variablen.

$y_i < 0$: g_i *schrumpft*, das System nähert sich dem Fixpunkt bei der RG-Transformation. \Rightarrow Der Anfangswert von g_i ist egal (solange er klein genug für die Linearisierung ist). g_i ist eine "irrelevante Variable".

\Rightarrow Universalität: Verschiedene physikalische Systeme haben denselben Fixpunkt (\Rightarrow dasselbe kritische Verhalten (s.u.)).

$y_i = 0$: In der linearen Näherung bleibt g_i konstant. "marginale Variable" \Rightarrow Es ist eine Näherung höherer Ordnung nötig.

- Bei $y_i = 0$ ist es auch möglich, dass die kritischen Exponenten sich kontinuierlich als Funktion eines Parameters in \mathcal{H} ändern, d.h. *keine* Universalität! Selten: (Nur?) 2-dim XY-Modell (s.u.) plus verwandte Modelle z.B. 2-dim SOS-Modell und 1-dim Spin-1/2-Quanten-Heisenberg-Modell (Spin-Kopplung nicht isotrop).

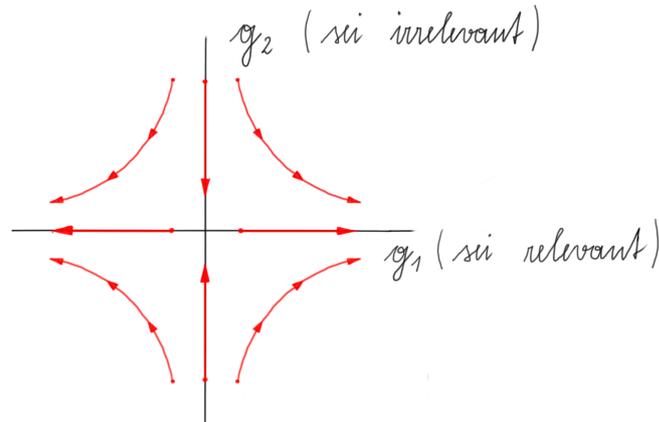


Abbildung 8.2: Renormierungsgruppenfluss für relevante/irrelevante Parameter.

- In der Regel gibt es nur wenige relevante Parameter. Beispiele:
 - Magnetische Systeme: 2 relevante Parameter: h, T
 - 3-dim Flüssigkeiten: ebenfalls 2 relevante Parameter: p, T
- Welche Parameter relevant sind und die Werte der kritischen Exponenten y_i hängen vom Fixpunkt ab.
- Ein System heißt “renormierbar”, wenn die Anzahl der relevanten Parameter endlich ist.

N.B. Elementarteilchenphysik: “Kontinuumsimes”

1. Beschreibe System auf grober Skala (oder mit kleinem maximalen Impuls)
2. Verfeinere die Skala \rightarrow brauche eventuell mehr Parameter
3. Forderung (nötig???): Kontinuumsimes existiert, d.h. die Raumzeit hat keine räumlich diskrete Struktur

Crossover: z.B. Situation mit 2 Fixpunkten: Fixpunkt A mit 1 relevanten und 1 irrelevanten Kopplung, Fixpunkt B mit 2 irrelevanten Kopplungen. Beim ursprünglichen System mit diesen Kopplungen “läuft” das System bei einer RG-Transformation (d.h. betrachten auf größerer Skala) zunächst näher zu A, dann zu B. Beispiel: Scheibe mit sehr großem Radius: System wirkt bei kleinen ξ 3-dimensional, danach 2-dimensional. (Entlang der RG-Fluss-Linie wächst die Korrelationslänge ξ .)

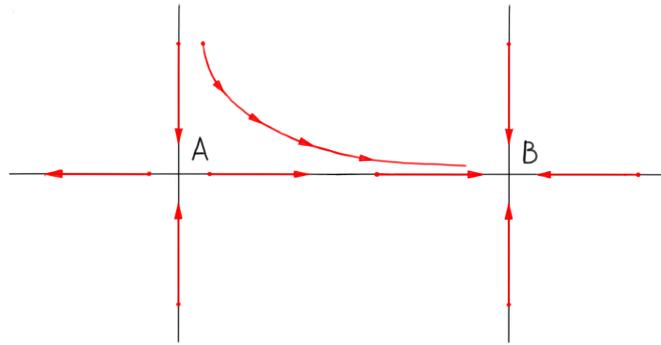


Abbildung 8.3: Crossover im Parameterraum. A hat einen relevanten Freiheitsgrad (x-Richtung), B hat nur irrelevante Freiheitsgrade.

8.3 Skalenverhalten und kritische Exponenten

Zur Erinnerung: Aus den thermodynamischen Definitionen folgen die “Skalenrelationen”

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \tag{8.6}$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \tag{8.7}$$

Mit Annahme über die Form der Korrelationsfunktion folgen auch die “Hyperscaling-Relationen”

$$\gamma \leq (2 - \eta)\nu \tag{8.8}$$

$$d\nu \geq 2 - \alpha \tag{8.9}$$

In Wirklichkeit findet man, dass diese Beziehungen als Gleichungen erfüllt sind.

Erklärung durch die Renormierungsgruppe

Die freie Energie pro Spin verhält sich bei RG-Transformationen wie $f' = b^d f$, d.h. $f(\vec{\mu}') = b^d f(\vec{\mu})$. Nahe am Fixpunkt ergibt dies

$$f(g'_1, g'_2, \dots) = b^d f(g_1, g_2, \dots) \tag{8.10}$$

$$\Rightarrow f(b^{y_1} g_1, b^{y_2} g_2, \dots) = b^d f(g_1, g_2, \dots) \tag{8.11}$$

Beispiel: Magnet: Man findet, dass dort nur 2 relevante Parameter existieren, nämlich $g_1 = t = \frac{T - T_c}{T_c}$ und $g_2 = h$, d.h. hier gilt (bei kleinen t und h)

$$f(t, h, g_3, \dots) = b^{-d} f(b^{y_1} t, b^{y_2} h, b^{y_3} g_3, \dots) \tag{8.12}$$

Kritischer Exponent α : spezifische Wärme

$$c \sim \left. \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right|_{h=0} \stackrel{!}{\sim} |t|^{-\alpha} \tag{8.13}$$

hier:

$$\frac{\partial^2 f(t, h=0, \dots)}{\partial t^2} = b^{-d} b^{2y_1} \left. \frac{\partial^2 f(g'_1, g'_2=0, \dots)}{\partial g_1'^2} \right|_{g_1'=b^{y_1} t} \tag{8.14}$$

Gleichung 8.14 stellt einen Bezug her zwischen der Wärmekapazität $\frac{\partial^2 f(t, \dots)}{\partial t^2}$ bei Temperatur t (linke Seite) und Temperatur $g'_1 = b^{y_1} t$ (rechte Seite). Mit dem Ansatz $c \propto |t|^{-\alpha}$ ergibt sich:

$$c(t) = b^{2y_1-d} c(b^{y_1} t) \quad (8.15)$$

$$|t|^{-\alpha} = b^{2y_1-d} |b^{y_1} t|^{-\alpha} \quad (8.16)$$

$$1 = b^{2y_1-d-y_1\alpha} \quad (8.17)$$

Da $b > 0$ kann der letzte Ausdruck logarithmiert und aufgelöst werden. Es ergibt sich:

$$\boxed{\alpha = 2 - \frac{d}{y_1}} \quad (8.18)$$

Alternative Herleitung:

Annahme: b ist kontinuierlich wählbar. Wähle b so, dass $b^{y_1} |t| = \text{const.}$ (bei Änderung von t) $\Rightarrow |t| \sim b^{-y_1}$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 f(t, h=0, \dots)}{\partial t^2} \sim b^{2y_1-d} \sim |t|^{\frac{d}{y_1}-2} \underbrace{\left. \frac{\partial^2 f(g_1, 0, \dots)}{\partial g_1^2} \right|_{g_1=\text{const.}}}_{=\text{const.}} \quad (8.19)$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha = 2 - \frac{d}{y_1}} \quad (8.20)$$

unabhängig vom Vorzeichen von t , d.h. $\alpha = \alpha'$.

Analog findet man:

$$\beta = (d - y_2) / y_1 \quad M \sim |t|^\beta \quad (8.21)$$

$$\gamma = (2y_2 - d) / y_1 \quad \chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (8.22)$$

$$\delta = y_2 / (d - y_1) \quad h \sim |M|^\delta \quad (8.23)$$

Hier gibt es nur 2 relevante Parameter (t, h)

\Rightarrow 2 Exponenten y_1, y_2 bestimmen 4 physikalische kritische Exponenten $\alpha, \beta, \gamma, \delta$

\Rightarrow Es gibt Beziehungen zwischen $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, nämlich die 2 Skalenrelationen.

Kritische Exponenten der Korrelationslänge: $\nu(\eta)$

Die Korrelationsfunktion $G(r) = \langle s_0 s_r \rangle - \langle s_0 \rangle \langle s_r \rangle$ wird mit der Transformation $s_i \rightarrow s'_i = c s_i$ in der Nähe des Fixpunktes:

$$G(r, t, h, g_3, \dots) \propto c^2(b) G\left(\frac{r}{b}, b^{y_1} t, b^{y_2} h, b^{y_3} g_3, \dots\right)$$

Längen skalieren bei der RG-Transformation also wie $|t|^{\frac{1}{y_1}}$. Das kritische Verhalten der Korrelationslänge ist $\xi \propto |t|^{-\nu}$ womit sich $\nu = \frac{1}{y_i}$ ergibt.

Da der kritische Exponent α auch nur von y_i abhängt, folgt eine „Hyperscaling“-Gleichung:

$$\boxed{2 - \alpha = d\nu}$$

8.4 Beispiel für eine RG-Rechnung

Wir benutzen das 1dimensionale Ising-Modell, da hier eine exakte Rechnung möglich ist. Als RG-Transformation wird jeweils nur jeder zweite Spin verwendet (siehe Abbildung) wodurch sich $b = 2$ ergibt. Der Renormierungsgruppenansatz liefert:

$$\mathcal{H} = -K \sum_i s_i s_{i+1} - H \sum_i s_i - \sum_i C \quad (8.24)$$

$$\text{Zunächst mit } K = \beta J; H = \beta h; C = \text{const}(s.u.) \quad (8.25)$$

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\mathcal{H}} = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=2,4,6,\dots} e^{K s_i (s_{i-1} + s_{i+1}) + H s_i + \frac{H}{2} (s_{i+1} + s_{i-1}) + 2C} \quad (8.26)$$

Summe über s_2, s_4, s_6, \dots

$$= \sum_{s_1, s_3, \dots} \prod_{i=2,4,\dots} \left[e^{K(s_{i-1} + s_{i+1}) + H + \frac{H}{2}(s_{i-1} + s_{i+1}) + 2C} + e^{-K(s_{i-1} + s_{i+1}) - H + \frac{H}{2}(s_{i-1} + s_{i+1}) + 2C} \right] \quad (8.27)$$

Umbenennung von i auf j

$$= \sum_{s_j} \prod_j \left[e^{(K + \frac{H}{2})(s_j + s_{j+1}) + H + 2C} + e^{-(K - \frac{H}{2})(s_j + s_{j+1}) - H + 2C} \right] \quad (8.28)$$

$$\stackrel{!}{=} \sum_{s_j} e^{-\mathcal{H}'} = \sum_{s_j} \prod_j e^{K' s_j s_{j+1} + H' s_j + C'} (+\text{ev. weitere Terme}) \quad (8.29)$$

Es wäre Umskalierung der Spins möglich, ist aber nicht notwendig. Hier ist es exakt lösbar und es gibt 3 Fälle:

- $s_j = s_{j+1} = 1$
- $s_j = s_{j+1} = -1$
- $s_j = -s_{j+1} = \pm 1$

Aus diesen 3 Fällen folgen 3 Gleichungen für 3 Unbekannte K', H', C' :

$$\begin{aligned} e^{2H'} &= e^{2H} \frac{\cosh(2K + H)}{\cosh(2K - H)} \\ e^{4K'} &= \frac{\cosh(2K + H) \cosh(2K - H)}{\cosh^2(H)} \\ e^{4C'} &= e^{8C} \cosh(2K + H) \cosh(2K - H) \cosh^2(H) \end{aligned}$$

Die ersten beiden Gleichungen sind unabhängig von C wodurch sich der RG-Fluss in K und H ergibt.

Nebenbemerkung:

Bei $T = \text{inf}$ kann die freie Energie f direkt berechnet werden und der RG-Fluss kann oft benutzt werden um f bei $T < \text{inf}$ zu berechnen.

9 Der Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang (topologisch!)

Typisch in 2 Dim. mit kontinuierlicher Symmetrie, auch relevant für High-Tc (2 Dim. schichten, $T > 0$), Helium Filme und 4 Dim. Gittereichtheorie.

Klassische Systeme: Flüssigkristalle

Entdeckt mit einer RG-Analyse 1974

Exakt in Body Centered Solid on Solid Modell („BCSOS-Modell“) = „6-Vertex-Modell“

9.1 Das klassische 2 Dim XY-Modell

Winkel $\Theta_n \in [0, 2\pi]$

$$\text{Energie: } H = J \sum_{\langle nm \rangle} \underbrace{\cos(\Theta_n - \Theta_m)}_{= \vec{s}_n \vec{s}_m}$$

$$\text{Zustandssumme: } Z = \sum_{\{\Theta_n\}} e^{-\beta H}$$

Globale Symmetrie: Rotation aller „Spins“ um den selben Winkel.

In $d = 2$ (Quadratgitter) hat das Modell sehr ungewöhnliche Eigenschaften.

Dazu: Das Mermin-Wagner-Theorem (rigoros, einzeln für jedes Modell)

- In $d \leq 2$ Dimensionen (Gitter) kann eine kontinuierliche globale Symmetrie (z.B. Θ) in einem klassischen System nicht „spontan gebrochen“ sein.

d.h. $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \Theta_n \rangle = 0$ bei allen Temperaturen

- Analog

– diskrete Symmetrie in $d = 1$

– Quantenmechanische Systeme bei $T > 0$ in $d \leq 2$

Weltlinienbild: Rechnung auf $d + 1$ dimensionalen Gitter da eine zusätzliche Dimension benötigt wird (Werte von $0 - \beta$). Ist β endlich und werden die räumlichen Dimensionen gegen unendlich geschickt, so verhält sich das System so, wie ein System mit der räumlichen Dimension. Deshalb gilt es für $d \leq 2$. Ist $T = 0$, dann ist $\beta = \infty$ und das Theorem gilt nur für $d = 1$.

NB:

Elitzer-Theorem:

Eine lokale kontinuierliche Symmetrie (z.B. in Eichtheorie $A_\mu(x, t) \rightarrow A_\mu(x, t) + \partial_\mu \lambda(x, t)$) kann nie spontan gebrochen werden.

zu unterscheiden:

1. Spontane Symmetrie Brechung „SSB“: $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle S_i \rangle \neq 0$
2. Langreichweitige Ordnung „LRO“: $\lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle S_i S_{i+R} \rangle \neq 0$
3. Von Null verschiedene „Stiffness“: $\Upsilon = \lim_{L \rightarrow \infty} \underbrace{\frac{1}{L^{d-1}}}_{\text{exponent richtig?}} \frac{\partial^2 F}{\partial \Phi^2}$

zu Stiffness: Hier wird ein periodisches System mit Randbedingungen betrachtet, bei dem sich der Winkel Θ am Rand um Φ ändert ($\Theta_{L+1} = \Theta_1 + \Phi$). Beispiele:

- XY-Modell
- Peierls-Phase (mag. Fluss) in elektromagnetischen Modellen
- Supraleitende Stiffness (\Rightarrow Meissner Effekt)

Man kann zeigen dass: SSB \Rightarrow LRO \Rightarrow endl. Stiffness (nur in diese Richtung mögliche).

Beispiel: Supraleitung!

Quantenmechanisch: „Off-Diagonal Long Range Order“ (ODLRO):

z.B. $\lim_{R \rightarrow \infty} \langle c_{\uparrow,0} c_{\downarrow,0} c_{\uparrow,0}^\dagger c_{\downarrow,0}^\dagger \rangle \neq 0$

ODLRO \Rightarrow endl. Stiffness

2d-XY-Modell

- Keine spontane Symmetriebrechung, keine LRO, aber Sprung in der Stiffness bei allen Temperaturen $T < T_{KT}$
- Phasenübergang „unendlicher Ordnung“. Freie Energie und alle ihre Ableitungen analytisch
- In der Tieftemperatur Phase ändern sich die kritischen Exponenten als Funktion der Temperatur!
Universalität verletzt!

Dies sieht man schon in einer Näherung:

Grenzfall sehr tiefer Temperatur (β groß)

Energie wichtig $\Rightarrow \Theta_n$ variiert räumlich langsam $\Rightarrow \cos(\Theta_n - \Theta_m) \approx 1 - \frac{1}{2}(\Theta_n - \Theta_m)^2$.

Diese Approximation heißt „Gaußsche Näherung“ da die Zustandssumme wie eine Gaußfunktion aussieht. Resultat: Spinwellen

Nach ein wenig Rechnen:

$$e^{i(\Theta_0 - \Theta_R)} \approx \underbrace{\left(\frac{1}{|R|} \right)^{\frac{1}{2\pi\beta J}}}_{\text{Potenzartig!}} \tag{9.1}$$

Kritischer Exponent ist eine Funktion von β !

Grenzfall hoher Temperaturen (β klein)

$$\langle e^{i(\Theta_0 - \Theta_R)} \rangle = \frac{1}{Z} \int_0^{2\pi} \left(\prod_j d\Theta_j \right) e^{i(\Theta_0 - \Theta_R)} \underbrace{e^{-\beta J \sum_{\langle nm \rangle} \cos(\Theta_n - \Theta_m)}}_{\text{Entwicklung in } \beta}$$

mit $\int_0^{2\pi} d\Theta = 2\pi$ und $\int_0^{2\pi} e^{-i\Theta} d\Theta = 0$ analog zu $\sum_{s_i=\pm 1} s_i = 0$

Nach Rechnung (Damit Integral einen Beitrag liefert benötigt man eine „Verbindung“ von Θ_0 und Θ_R mittels Faktoren von $\beta J \cos(\Theta_n - \Theta_m)$):

$$\langle e^{i(\Theta_0 - \Theta_R)} \rangle \approx (\beta J)^R = e^{-R \ln(\frac{1}{\beta J})} \rightarrow \xi = \frac{1}{\ln(\frac{1}{\beta J})} \quad (9.2)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \xi = \infty$$

Tatsächlich

$\xi < \infty$ oberhalb von T_{KT} und $\xi = \infty$ mit potenzartiger Korrelationsfunktion für alle $T \leq T_{KT}$.

„Anregungen“ des XY-Modells:

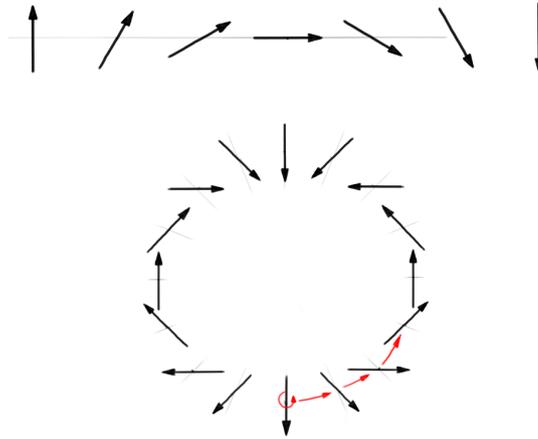


Abbildung 9.1: Anregungen des XY-Modells: Spinwellen(oben) und Vortizes(unten)

1. Spinwellen (in gaußscher Näherung enthalten)

2. „Vortizes“

$$\text{Windungszahl } q := \frac{1}{2\pi} \oint \nabla \Theta d\vec{r}$$

Dies sind „Topologische“ Objekte: lokale Spinänderung können keine Vortizes erzeugen oder Vernichten.

Eigenschaften:

- Energie (Wechselwirkung) eines Vortexpaares (im Abstand R in 2d): $\Delta E = \dots = \ln(R)$
- Entropie dazu: 2 Vortex kann an allen N Plätzen des Gitters sitzen.
- Freie Energie eines zusätzlichen Vortex in Umgebung von Vortizes (positiv oder negativ?) $\Delta F = E - TS = \underbrace{c_1 \ln(R)}_{c'_1 \ln(N)} - c_1 T \ln(N) \propto (T_c - T) \ln(N)$

Bei tiefen Temperaturen: wenige Vortizes, meist in gebundenen Paaren.
Bei hohen Temperaturen: „viele Vortizes“, „Kondensat“

9.2 Verwandte Modelle (alle in d=2)

Zeigen alle KT-Übergang und gleiches RG-Verhalten: XY kann man mit folgenden Modellen nähern:

- Villain-Modell
XY \approx DGSOS-Modell (Discrete Gaussian Solid on Solid; Dualitätstransformation via Gaußscher Integration).
$$Z \propto \sum_{\{h_i\}} e^{-\frac{1}{\beta} \sum_{\langle ij \rangle} (h_i - h_j)^2}$$
Diskrete Höhen: $h_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$
- XY = Skalares masseloses Feld mit Quellen \approx „Sine-Gordon-Modell“ (angelehnt an Klein Gordon Gleichung)
- XY-Modell \approx Spinwellen + (unabhängig in Näherung) „Coulomb-Gas“ von Vertizes
- BCSOS-Modell (exakt lösbar) = „6-Vertex-Modell“
$$Z = \sum_{h_i=0,\pm 1,\pm 2,\dots} e^{-\frac{1}{\beta} \sum_{\langle ij \rangle} |h_i - h_j|}$$
 mit Einschränkung dass $h_i - h_j = 0, \pm 1$.
Ein limes dieses Modells ist das 1 dim Spin $\frac{1}{2}$ Quanten-Heisenberg Modell ???

9.3 Einige Ergebnisse der RG-Analyse

- Kritische Temperatur: $\pi\beta_{KT}J - 2 \approx e^{-\frac{\pi^2}{2}\beta_{KT}J}$
- Korrelationslänge nahe T_{KT} :
 $T > T_{KT} : \xi \propto e^{\text{const} \sqrt{\frac{T_{KT}}{T - T_{KT}}}}$
 $T < T_{KT} : \xi = \infty$
- Freie Energie pro Platz: $\beta f \propto \frac{1}{\xi^2}$
- Korrelations Funktion bei T_{KT} : $\langle e^{i(\Theta_0 - \Theta_R)} \rangle \propto \left(\frac{1}{R}\right)^\eta$ mit $\eta = \frac{1}{4}$
- Stiffness (= Helizität): Sprung bei T_{KT} von $\Upsilon = 2T_{KT}$ auf 0