

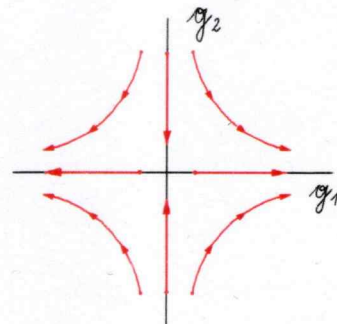
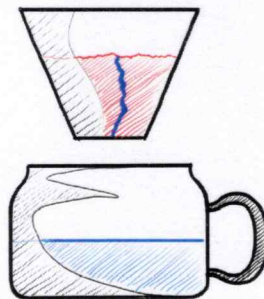
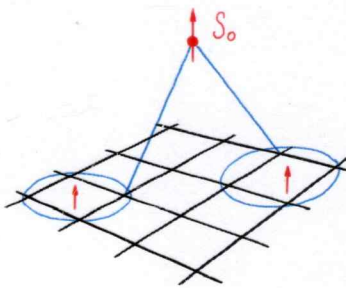
# Phasenübergänge und kritische Phänomene

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

<b>1 Einführung</b>	<b>5</b>
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
<b>2 Die Zustandssumme und ihre Ableitungen, Kritische Exponenten</b>	<b>10</b>
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 $\lambda$ . . . . .	15
2.5.2 Ungleichungen für die kritischen Exponenten . . . . .	16
2.6 Zur Renormierungsgruppe . . . . .	16
<b>3 Modelle und Darstellungen</b>	<b>18</b>
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
<b>4</b>	<b>Finite Size Scaling (FSS)</b>	<b>39</b>
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
<b>5</b>	<b>Mean Field</b>	<b>42</b>
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
<b>6</b>	<b>Reihenentwicklungen</b>	<b>52</b>
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
<b>7</b>	<b>Transfermatrix</b>	<b>58</b>
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
<b>8</b>	<b>Renormierungsgruppe</b>	<b>65</b>
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
<b>9</b>	<b>Der Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang (topologisch!)</b>	<b>73</b>
9.1	Das klassische 2 Dim XY-Modell . . . . .	73
9.2	Verwandte Modelle (alle in $d=2$ ) . . . . .	76
9.3	Einige Ergebnisse der RG-Analyse . . . . .	76

Weiteres Buch: Yeomans , Statistical Mechanics of Phase Transitions



# 1 Einführung

## 1.1 Phasenübergänge

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

### 1.1.1 Beispiel: Flüssigkeit-Gas

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

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

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

*"t" "reduzierte Temp"*

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

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

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

*(T-Tc)/Tc ~ alpha*

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

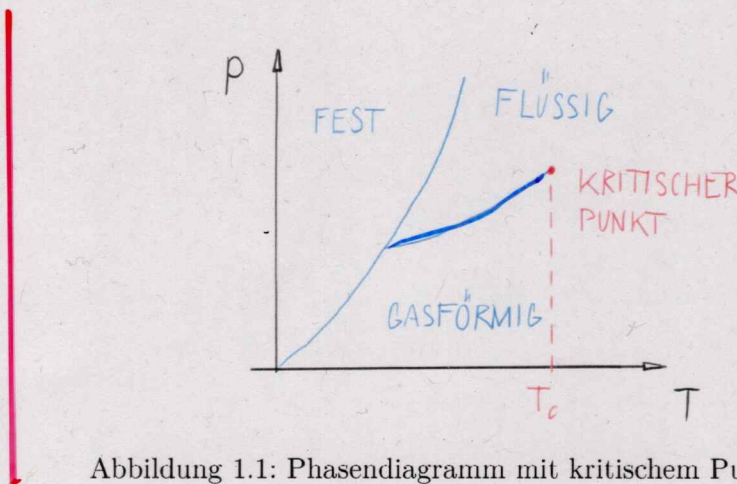


Abbildung 1.1: Phasendiagramm mit kritischem Punkt  $T_c, p_c$

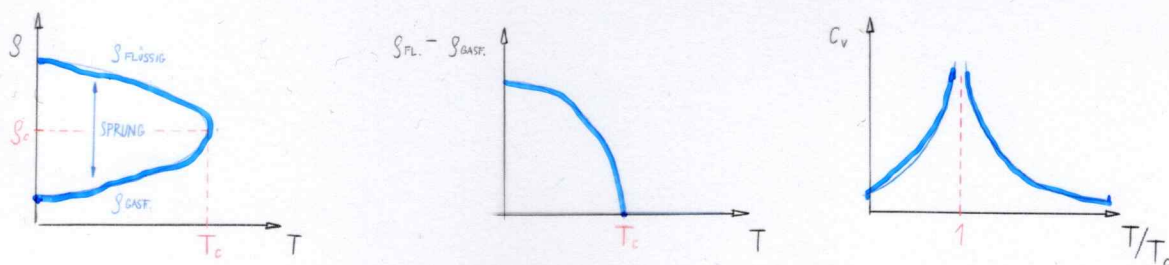


Abbildung 1.2: (a) Dichte über Temperatur. Für  $T < T_c$  gibt es einen Sprung in der Dichte. (b) Selbe Information in der Darstellung als Ordnungsparameter  $\rho_{fl} - \rho_{gas}$  (c) Singularität in der Wärmekapazität am Phasenübergang

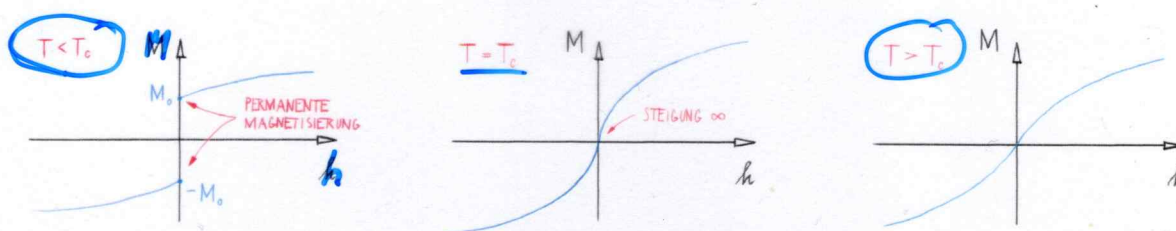


Abbildung 1.3: Magnetisierung  $M$  in Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld  $h$  für ferromagnetisches System für Temperaturen  $T < T_c$ ,  $T = T_c$  und  $T > T_c$ .

### 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

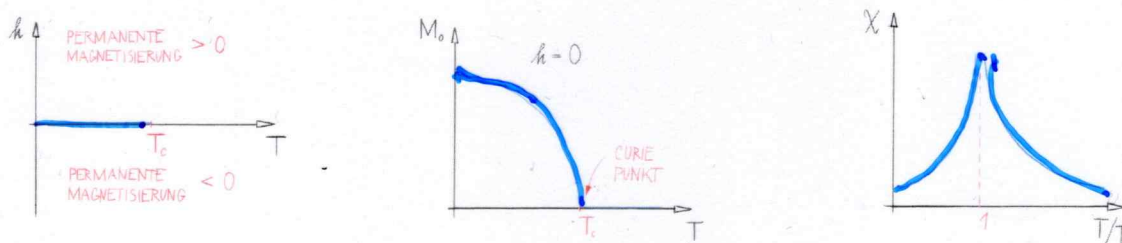


Abbildung 1.4: (a) Phasendiagramm des ferromagnetischen Systems, mit den beiden „Phasen“  $M_0 > 0$  und  $M_0 < 0$ . (b) Ordnungsparameter  $M_0$  als Funktion der Temperatur. (c) Singularität in der Suszeptibilität  $\chi$  als Funktion der Temperatur.



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  $\beta$  wieder der kritische Exponent des Ordnungsparameters ist.

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

### 1.1.3 Andere Phasenübergänge

*alle mit dem gleichen Werkzeug beschreibbar*

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

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

*(wie 3d Ising!)*

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

QM

## 1.2 Universalität

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

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

1. Räumliche Dimension des Systems *← ab  $\frac{1}{r^2}$*
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.

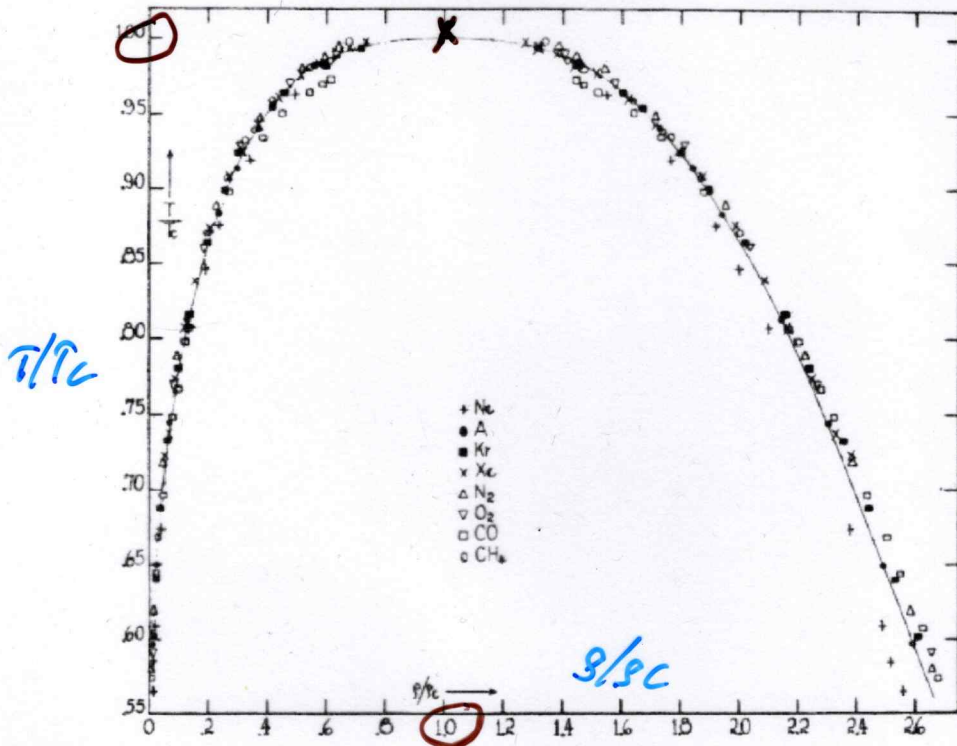


Abbildung 1.5: Skalierte Koexistenzkurven für verschiedene Gase. In diesem Beispiel stimmen die Kurven sogar weit weg vom kritischen Punkt sehr gut überein.

### 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 ( $\text{CO}_2$ , Xe, etc.) können beispielsweise durch ein 3D Ising Modell beschrieben werden.

+ Magnetismus

**Vorsicht** beim Vereinfachen von Hamilton-Operatoren:

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

→ gegen Ende der Vorlesung behandelt

Kosterlitz-Thouless Übergang topologisch!

(Nobel-Preis...)



### 1.3 Mikroskopisches Modell: Ising-Modell

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

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

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

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

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

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

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

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

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

*Def M: s.S. 12*



## 2 Die Zustandssumme und ihre Ableitungen, Kritische Exponenten

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

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

Die Erkenntnis aus der Thermodynamik ist, dass die Wahrscheinlichkeit für  $\alpha$  gleich der Boltzmann-Wahrscheinlichkeit ist.

Die Wahrscheinlichkeit für einen Zustand  $\alpha$  ist:

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

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

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

### 2.1 Thermodynamische Erwartungswerte

Hier werden aus der Zustandssumme berechenbare Erwartungswerte betrachtet.

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

#### 2.1.1 Zustandssumme

Die Zustandssumme ist quantenmechanisch definiert als

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

wobei  $\alpha$  die Eigenbasis von  $\hat{H}$  ist.

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

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

von lokalen Größen

Der größte Teil dieser Vorlesung wird sich mit klassischen Effekten beschäftigen

(QM Heisenberg-Modell s.S.19)

#### 2.1.2 Beispiel: Innere Energie

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

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



2.1.3 Beispiel: Freie Energie

Die freie Energie F ist definiert über

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

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

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

mit der Entropie:

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

2.1.4 Beispiel: Spezifische Wärme

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

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

2.2 Äußere Felder

Diese entsprechen Nebenbedingungen, z.B. Volumen.

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

Einige Beispiele:

(Parameter)	Nebenbedingung	$V_i$	Typischer Beitrag zu H
	<u>Volumen</u>	V	<u><math>-pV</math></u>
	<u>magnetisches Feld</u>	h	$\frac{-Mh,}{M = \sum_i M_i \sim \sum_i s_i}$
	<u>chemisches Potential</u>	$\mu$	<u><math>-N\mu</math></u>

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

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

Vorsicht:

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

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

$P_i, \dots$   
 $M_i, N_i, \dots$

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

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

(alpha hier für Systemzustand, auch bei p\_alpha)

### 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

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

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

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

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

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

" $\sim N$ "  
↓

extensiv!

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

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

N.B.

**Achtung: Remanente Magnetisierung**

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

"spontane" sym. bruch SSB (2.11)

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

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

### 2.3.2 Für allgemeine Größen $p_i$

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

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

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



## 2.4 Korrelationsfunktionen

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

Def.: Korrelationsfunktion

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



*z.B. Ising-Modell bei T=0*

2.4.1 Ohne Wechselwirkung

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

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

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

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

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

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

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

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

*Strom (beta mu h)*

beta mu h = (Energie mu h) / (Energie k\_B T)

~~2.4.2 Mit Wechselwirkung~~

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

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

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

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

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

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

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

Mit  $\xi$  der Korrelationslänge und  $\tau$  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  $\eta$  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  $\eta$ .



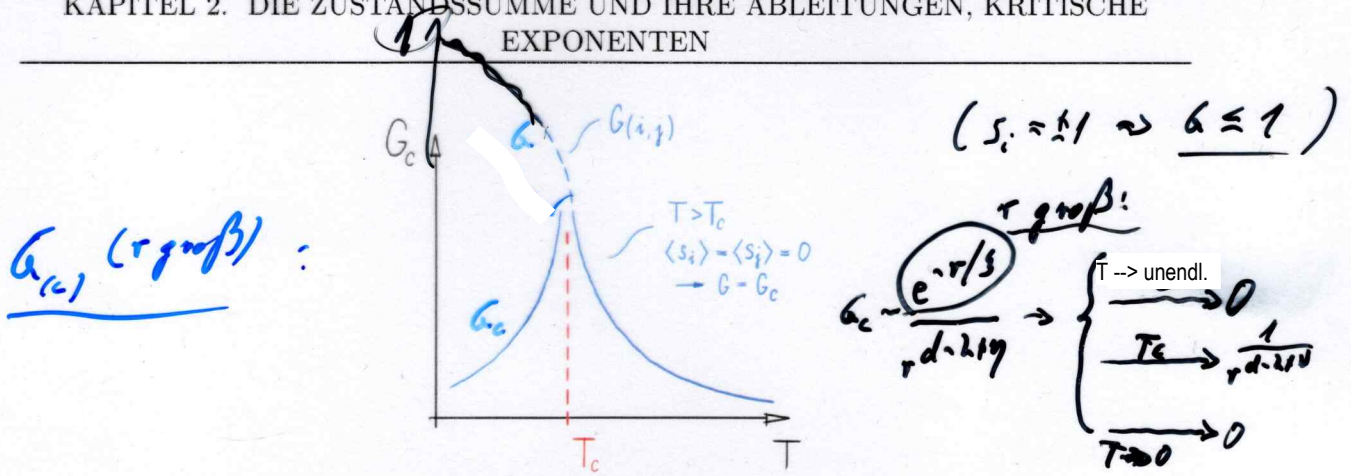


Abbildung 2.1: Typisches Verhalten der verbundenen Korrelationsfunktion  $G_c(i,j)$  bei verschwindendem Magnetfeld ( $h = 0$ ). und bei großen Abständen  $r$

### 2.4.3 Allgemeiner Zugang

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

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

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

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

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

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

und der verbundenen Korrelationsfunktion:

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

### 2.5 Kritische Exponenten

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

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

zu definieren.



2.5.1 Allgemeine Definition eines kritischen Exponenten  $\lambda$

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

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

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

Eine genauere Betrachtung erhält man über eine Potenzreihenentwicklung:

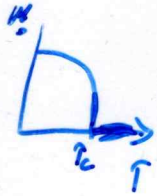
$$f(t) \propto \underbrace{|t|^\lambda}_{\text{niedrigste Potenz}} (1 + \overbrace{bt^{\lambda_1} + \dots}^{\text{Korrekturen (fallen schneller ab)}}) \quad \lambda_1, \dots > 0 \quad (2.25)$$

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

Eine äquivalente Definition von  $\lambda$  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  $\lambda$ . 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)



*Aber ansonsten: Universalität  $\lambda_- \approx \lambda_+$ !*

Beispiele:

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

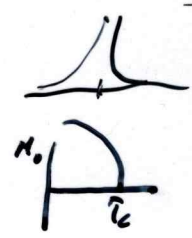
$$f(t) = At^2 e^{-t} = At^2(1 - t + t^2 - \dots) \rightarrow \lambda = 2$$

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

*→ Abb 5.10*

Tabelle 2.1: Die kritischen Exponenten im Überblick

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



Exakt

2.5.2 Ungleichungen für die kritischen Exponenten

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

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

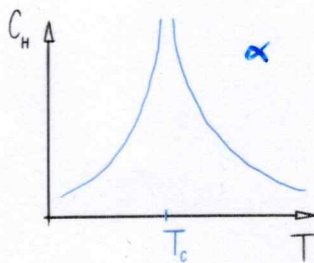
⇒ ... ⇒

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

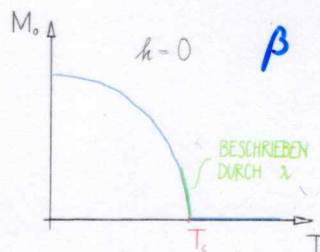
$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad = \text{Scaling relations} \quad (2.29)$$

(Hyperscaling)

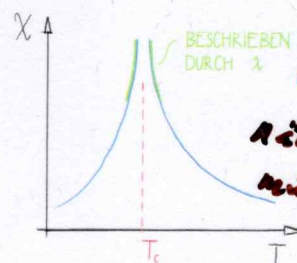
Beide Ungleichungen stimmen exakt. Zwei weitere Ungleichungen kommen unter "plausiblen Annahmen hinzu. Im Experiment sind diese Ungleichungen als Gleichungen erfüllt. Dies lässt sich mit Hilfe der Renormierungsgruppe zeigen (siehe Kapitel: 8).



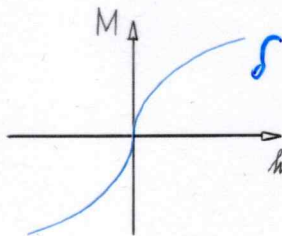
Spezifische Wärme



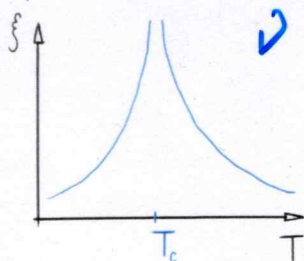
Ordnungsparameter



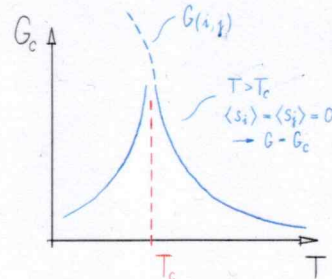
Suszeptibilität



Kritische Isotherme



Korrelationslänge



Korrelationsfunktion

! → nur 2 unabh. krit. Exp. → 2 Größen n im (T, h) müssen eingestellt werden bei T\_c ? bei T\_c

Abbildung 2.2: Die kritischen Exponenten im Überblick

2.6 Zur Renormierungsgruppe

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

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



## KAPITEL 2. DIE ZUSTANDSSUMME UND IHRE ABLEITUNGEN, KRITISCHE EXPONENTEN

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

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

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

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

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

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

Analoges Verhalten NICHT bei exp-Funktion