

Phasenübergänge und kritische Phänomene

Carsten Timm

Sommersemester 2000

7/2000

Das vorliegende Skript wurde für eine Vorlesung über Phasenübergänge und kritische Phänomene im Umfang von zwei Semesterwochenstunden erstellt. Es beginnt, nach einer kurzen Wiederholung zur Thermodynamik, mit der Landau-Theorie für kontinuierliche Phasenübergänge und führt schließlich zur Renormierungsgruppen-Theorie. Kapitel über Fluktuationen, topologische Defekte und exakt lösbare Modelle sind ebenfalls enthalten. Es wurde der Versuch unternommen, die wesentlichen Ideen hinter den verschiedenen Methoden an Hand von Beispielen zu verdeutlichen. Natürlich konnten nicht alle wichtigen Aspekte im Rahmen einer zweistündigen Vorlesung behandelt werden, z.B. feldtheoretische Methoden und quantenkritische Punkte. Ein Anhang enthält Aufgaben, überwiegend mit Lösungen, wobei das Schwergewicht auf konzeptionellem Verständnis und nicht auf Rechenfertigkeiten liegt. Eine kurze Liste empfohlener Literatur ist ebenfalls vorhanden.

Inhaltsverzeichnis

1 Grundlagen	4
1.1 Einführende Beispiele für Phasenübergänge	4
1.1.1 Einfache Flüssigkeiten	4
1.1.2 Isotroper Ferromagnet	6
1.1.3 Weitere wichtige Systeme	7
1.2 Wiederholung zur Thermodynamik	8
1.2.1 Allgemeines	8
1.2.2 Flüssigkeiten	8
1.2.3 Ferromagnetika	9
1.2.4 Geometrische Interpretation	10
1.2.5 Ordnung von Phasenübergängen	10
1.3 Kritische Exponenten	11
1.3.1 Allgemeine Definition	11
1.3.2 Spezielle Exponenten	11
1.3.3 Ungleichungen	12
1.3.4 Weitere Bemerkungen	12
2 Landau-Theorie	13
2.1 Allgemeines	13
2.2 Ein ferroelektrisches Modellsystem	13
2.2.1 Das Modell und seine Symmetrien	13
2.2.2 Entwicklung des thermodynamischen Potentials	14
2.2.3 Ordnungsparameter p_z^0	15
2.2.4 Ordnungsparameter (p_x^0, p_y^0)	17
2.2.5 Sekundäre Ordnungsparameter	17
2.3 Das klassische ferromagnetische Heisenberg-Modell	18
2.3.1 Darstellung des Modells	18
2.3.2 Kritische Exponenten	19
2.4 Zusammenfassung der kritischen Exponenten gemäß der Landau-Theorie	19
2.5 Übergänge erster Ordnung in der Landau-Theorie	20
2.5.1 Übergänge mit Ordnungsparameter bei instabilem Term vierter Ordnung	20
2.5.2 Andere Typen von Übergängen erster Ordnung	20
2.6 Multikritische Punkte	21
3 Molekularfeld-Theorien	23
3.1 Weiß'sche Theorie des Ferromagnetismus	23
3.1.1 Effektives Feld	23
3.1.2 Quantisierter Spin im Magnetfeld	24
3.1.3 Diskussion	25
3.2 BCS-Theorie der Supraleitung	25
4 Fluktuationen	27
4.1 Zustandssumme und thermodynamische Potentiale	27
4.2 Grenzen der Landau-Theorie	27
4.2.1 Verallgemeinerte Suszeptibilität	28
4.2.2 Korrelationsfunktionen	28
4.2.3 Gradientenentwicklung	29

4.2.4	Landau-Theorie für Suszeptibilität und Korrelationsfunktion	29
4.2.5	Ginzburg-Kriterium I	31
4.2.6	Obere kritische Dimension	32
4.3	Gauß'sche Fluktuationen	32
4.3.1	Allgemeine Formulierung	32
4.3.2	Gauß'sche Fluktuationen im ϕ^4 -Modell	33
4.3.3	Ginzburg-Kriterium II	35
4.4	Goldstone-Moden und das Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorem	36
4.4.1	Goldstone-Moden	36
4.4.2	Typen von Ordnung	38
4.4.3	Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorem	40
4.5	Kritische Fluktuationen	41
4.5.1	Allgemeines	41
4.5.2	Näherung des selbstkonsistenten Feldes (RPA)	41
5	Topologische Defekte	44
5.1	Gebrochene kontinuierliche Symmetrie	44
5.1.1	Vortizes	44
5.1.2	Hedgehogs	47
5.1.3	Homotopie-Theorie	47
5.1.4	Meronen und Skyrmionen	48
5.2	Gebrochene diskrete Symmetrie	50
5.2.1	Domänenwände	50
5.2.2	Energie einer Domänenwand	51
6	Exakt lösbare Modelle	52
6.1	Eindimensionales Ising-Modell im äußeren Feld	52
6.1.1	Transfermatrix-Methode	52
6.1.2	Kritisches Verhalten	53
6.2	Zweidimensionales Ising-Modell	55
6.2.1	Lösung mittels Graphen	55
6.2.2	Kritisches Verhalten	57
6.2.3	Dualitätstransformation und exaktes T_c	58
6.3	Weitere exakt lösbare Modelle	60
7	Renormierungsgruppen-Theorie	62
7.1	Skalenhypothese	62
7.1.1	Skalenbeziehungen	62
7.1.2	Hyperskalierung	64
7.2	Renormierungsgruppe: Einführung	65
7.2.1	Effektiver Hamiltonian und Blockspins	65
7.2.2	Kadanoff-Konstruktion	66
7.2.3	Relevanz von Feldern, Korrekturen zum Skalenverhalten	68
7.2.4	Andere Methoden der Dezimierung	69
7.3	Ising-Modell	70
7.3.1	Eindimensionales Ising-Modell	70
7.3.2	Behandlung des 1D Ising-Modells in der Renormierungsgruppen-Theorie	71
7.3.3	Mehrdimensionales Ising-Modell: Migdal-Kadanoff-Methode	72
7.4	Renormierungsgruppen-Flüsse beim Heisenberg-Modell	75
7.5	Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Theorie	77
7.5.1	Einführung	77
7.5.2	Kosterlitz-Renormierungsgruppe	78
7.5.3	Ergebnisse der BKT-Theorie	81

A	Aufgaben	85
A.1	Kritische Exponenten eines zweidimensionalen Ferromagneten	85
A.2	Konstruktion von Landau-Theorien	85
A.2.1	Anisotroper Ferromagnet	85
A.2.2	Superfluides ^4He	85
A.2.3	Uniaxialer Ferromagnet mit Übergang erster Ordnung	86
A.2.4	Landau-Theorie am trikritischen Punkt	87
A.3	BCS-Theorie der Supraleitung	87
A.4	Landau-Theorie mit inhomogenem Ordnungsparameter	88
A.4.1	Gradientenentwicklung	88
A.4.2	Ginzburg-Kriterium am trikritischen Punkt	89
A.5	Gauß'sche Fluktuationen	90
A.6	Goldstone-Moden	90
A.7	Quasi-langreichweitige Ordnung	91
A.8	Topologische Defekte	91
A.8.1	Windungszahl von Vortizes	91
A.8.2	Windungszahl von Hedgehogs	92
A.8.3	Homotopie-Theorie	92
A.8.4	Domänenwände beim Antiferromagneten auf dem Dreiecksgitter	92
A.9	Skalengesetze	92
A.10	Renormierungsgruppen-Theorie	93
A.10.1	Irrelevante Felder	93
A.10.2	Kadanoff-Konstruktion für diskrete Spinwerte	94
A.10.3	Renormierungsgruppe und anisotropes Heisenberg-Modell	94
A.10.4	BKT-Theorie mit Termen höherer Ordnung	95
B	Verzeichnis von Lehrbüchern	96
B.1	Umfassende Darstellungen	96
B.2	Darstellungen zu Teilbereichen	96

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Einführende Beispiele für Phasenübergänge

Neben kontinuierlichen Variationen ihres Zustands zeigen zahlreiche Systeme auch abrupte Änderungen, wenn die Temperatur oder eine andere Größe einen bestimmten, scharfen Wert über- oder unterschreitet. Diese abrupten Änderungen, die wir *Phasenübergänge* nennen, sind oft mit einer *qualitativen*, nicht nur quantitativen Veränderung des Systems verbunden. Bekannte Beispiele sind:

- fest – flüssig (und fest – gasförmig)
- flüssig – gasförmig
- magnetisch geordnet – ungeordnet
- superflüssig – normal flüssig
- supraleitend – normalleitend

Man würde gern verstehen, wie es zu solchen abrupten Änderungen kommt und wie man sie beschreiben kann. Das ist Gegenstand dieses Skriptes. Zunächst betrachten wir einige einfache Beispiele.

1.1.1 Einfache Flüssigkeiten

Schmelz- und der Siedetübergang von Wasser sind aus dem Alltag bekannt. Wasser-Moleküle sind jedoch polar, so dass Wasser keine einfache Flüssigkeit ist. Wir betrachten stattdessen Edelgase, Kohlendioxid oder Methan (CH_4). Im *thermischen Gleichgewicht* (dem Zustand, der sich im isolierten System nach hinreichend langer Zeit einstellt und dann nicht mehr ändert) läßt sich das System durch wenige, hier drei, *Zustandsgrößen* beschreiben:

- Druck p
- Temperatur T
- Dichte $\rho = N/V$ (N : Teilchenzahl, V : Volumen)

Zwischen diesen Größen besteht eine Beziehung, die *Zustandsgleichung*, die für ein *ideales Gas* lautet

$$p = \rho k_B T. \quad (1.1)$$

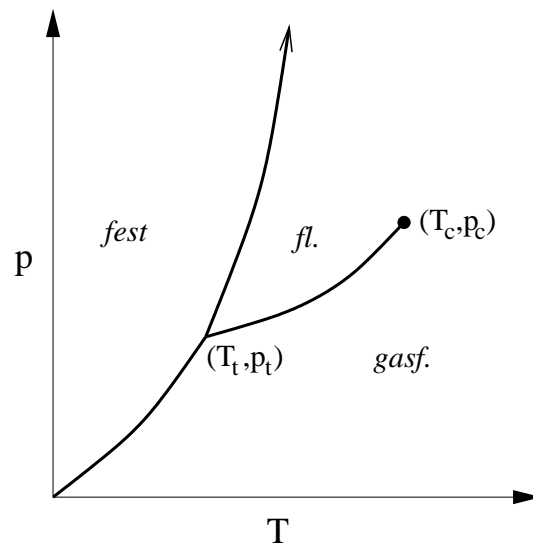
Das ideale Gas zeigt keine Phasenübergänge. In realen Gasen hat die Zustandsgleichung die allgemeine Form

$$f(p, T, \rho) = 0, \quad (1.2)$$

wo f eine beliebige (aber glatte) Funktion ist. Beispiel: die Zustandsgleichung des *van-der-Waals-Gases* lautet

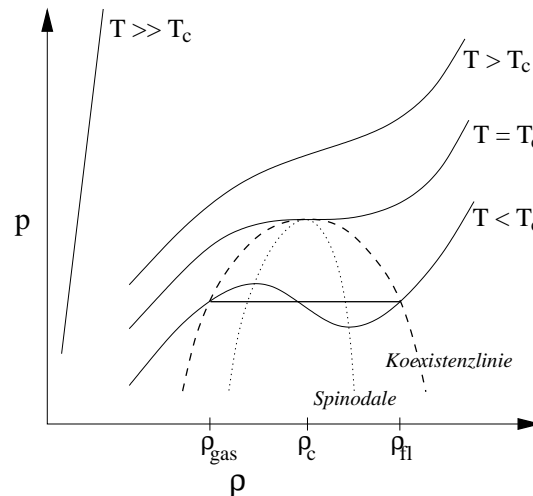
$$(p + a\rho^2)(1 - b\rho) = \rho k_B T. \quad (1.3)$$

Also: Nur zwei der Größen p , T , ρ sind unabhängig – sind zwei gegeben, so ist die dritte bestimmt. Im 3D Raum mit den Koordinaten p , T , ρ beschreibt die Zustandsgleichung eine Fläche, auf der die Zustandsgrößen des Systems liegen müssen. Es ist instruktiv, Projektionen dieser Fläche auf die 2D Unterräume (T, p) , (p, ρ) und (T, ρ) zu betrachten.



Projektion auf (T, p) : das bekannte „Phasendiagramm“. Interpretation: Druck und Temperatur vorgegeben.

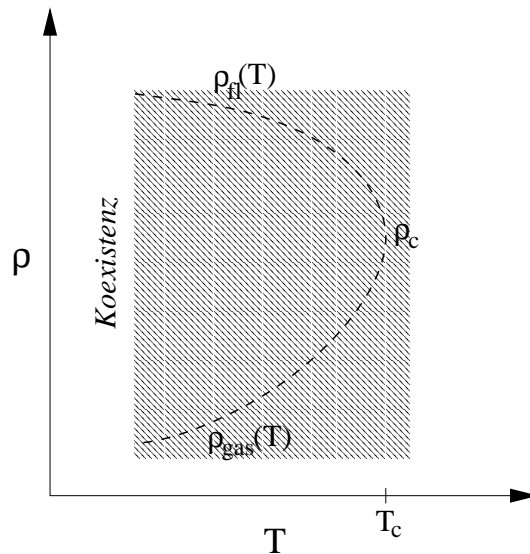
- Phasen: fest, flüssig, gasförmig
- Phasenübergänge *erster Ordnung*: Auftreten latenter Wärme
- Phasenübergänge (erster Ordnung): mindestens zwei Phasen stehen im Gleichgewicht
- Tripelpunkt: drei Phasen im Gleichgewicht
- kritischer Punkt (p_c, T_c, ρ_c) : Siedeübergang (Dampfdruckkurve) *endet* hier – man kommt von flüssig nach gasförmig, ohne dass ein Phasenübergang stattfindet \Rightarrow Flüssigkeit und Gas sind nicht qualitativ verschieden
- *kein* kritischer Punkt beim Schmelzübergang (Schmelzdruckkurve) \Rightarrow Festkörper und Flüssigkeit/Gas sind qualitativ verschieden – der Festkörper hat *niedrigere* Translations- und Rotationssymmetrie (z.B. nur Translation um Gittervektoren)



Projektion des Siedeübergangs auf (ρ, p) mit *Isothermen* (Linien gleicher Temperatur). Vorstellung: Dichte und Druck vorgegeben. Bei sehr hoher Temperatur Verhalten wie ideales Gas. Bei Absenkung der Temperatur Erreichen des kritischen Punktes bei $T = T_c$. Für $T < T_c$ existiert (zwischen den sog. *Spinodalen*) ein Bereich mit $\partial p / \partial \rho < 0 \rightarrow$ Instabilität (Dichteschwankungen nehmen zu, statt sich auszugleichen) führt zur *Phasenseparation*. D.h. flüssige und gasförmige Phase stehen im Gleichgewicht.

Beide Phasen müssen dieselben p, T haben. Da T gegeben ist und wir uns am Siedeübergang befinden, ist $p = p_D(T)$ dann bestimmt (Dampfdruck) und unabhängig von ρ . Bei welcher Dichte tritt Phasenseparation zuerst auf? \rightarrow *Maxwell-Konstruktion*: Die Ausdehnungsarbeit ist dieselbe, egal ob man auf direktem Weg (phasensepariert) oder entlang der (instabilen) Isothermen geht,

daher ist die Fläche unter beiden Kurven im (V, p) -Diagramm gleich (nicht im angegebenen (ρ, p) -Diagramm). Phasenseparation setzt bereits ein, wenn die Spinodale noch gar nicht erreicht ist.



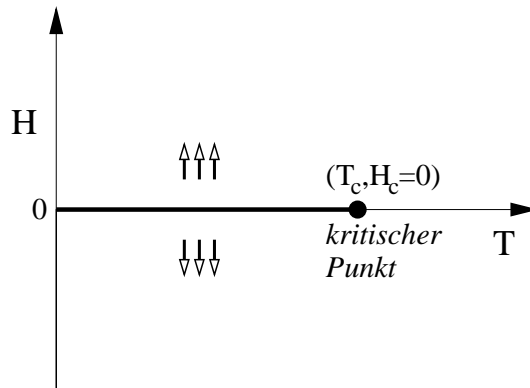
Projektion des Siedeübergangs auf (T, ρ) (denke Temperatur und Dichte/Volumen vorgegeben). Beachte Koexistenzgebiet. Es besteht eine enge Analogie zwischen dem Siedeübergang und dem *Ferromagneten*.

1.1.2 Isotroper Ferromagnet

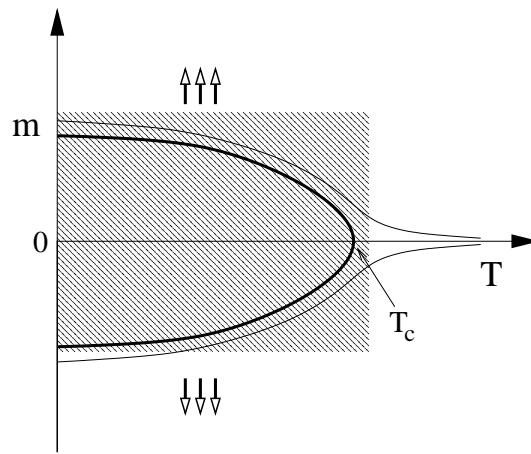
In Analogie zur Flüssigkeit: Im äußeren homogenen, statischen Magnetfeld H wird ein isotroper Ferromagnet im Gleichgewicht durch die Zustandsgrößen

- Magnetfeld H
- Temperatur T
- Magnetisierung m (im isotropen Fall entlang der Richtung von H)

beschrieben, zwischen denen eine Zustandsgleichung $f(H, T, m)$ besteht. (Wir betrachten hier nur Felder entlang einer Richtung, bei Betrachtung von dreikomponentigen \mathbf{H} und \mathbf{m} ergibt sich nichts wesentlich Neues.)



Projektion auf die (T, H) -Ebene mit kritischem Punkt ($H_c = 0, T_c, m_c = 0$) am Ende einer Linie von Übergängen erster Ordnung. Die \uparrow und \downarrow Phasen sind nicht qualitativ verschieden – man kann die Magnetisierung stetig umkehren, wenn man dazu auf $T > T_c$ erwärmt.



Projektion auf (T, m) . Im Koexistenzgebiet koexistieren hier Bereiche (*Domänen*) mit unterschiedlicher Magnetisierungsrichtung.

Wir sehen: $m = 0$ für $T > T_c$, während $m \neq 0$ für $T < T_c$.

- Für $H = 0$, $T < T_c$ sind zwei (\uparrow, \downarrow) (im Vektormodell für \mathbf{m} unendlich viele) Grundzustände *entartet*, da die Zustandsgleichung keinen auszeichnet (speziell $f(H, T, -m) = f(H, T, m)$), aber nur einer davon ist tatsächlich realisiert \rightarrow *spontane Symmetriebrechung*.
- Wie wir sehen werden, ist das das typische (sogar das *definierende*) Verhalten eines *Ordnungsparameters*. Wir vermuten also, dass die Magnetisierung der Ordnungsparameter des Ferromagneten ist.

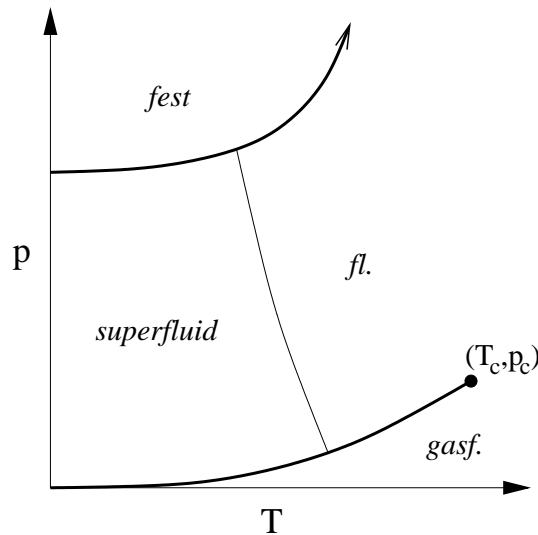
1.1.3 Weitere wichtige Systeme

(a) Lageordnung in Legierungen (Beispiel β -Messing CuZn): Für $T < T_c = 465^\circ\text{C}$ sitzen die Cu- und Zn-Atome auf zwei verschiedenen (einfach kubischen) Untergittern, ergibt CsCl-Struktur. Für $T > T_c$ sind die Atome weitgehend statistisch auf die Untergitter verteilt. Für diese spezielle Legierung tritt keine latente Wärme auf.

(b) Orientierungsordnung (Beispiel Ammoniumchlorid NH_4Cl): CsCl-Struktur. Für $T < T_c = -17^\circ\text{C}$ sind die NH_4^+ -Tetraeder gleich ausgerichtet, für $T > T_c$ sind die Orientierungen statistisch verteilt.

(c) Strukturänderungen im Kristall (Beispiel Kohlenstoff): Übergang zwischen Graphit (Niederdruck-Phase) und Diamant (Hochdruck-Phase) bei etwa $p \approx 10^6\text{--}10^7$ Pa. Diamant ist bei Normaldruck nur *metastabil*, zerfällt aber aufgrund einer sehr hohen Potentialschwelle praktisch nicht in Graphit.

(d) Superfluides Helium-4:



(T, p) -Projektion (Phasendiagramm) für ^4He (nicht maßstabgetreu!).

- kein Tripelpunkt

- Auftreten eines neuen Phasentübergangs („ λ -Übergang“) zwischen zwei verschiedenen flüssigen Phasen, kontinuierlicher Übergang

1.2 Wiederholung zur Thermodynamik

1.2.1 Allgemeines

Die Thermodynamik beschreibt das Verhalten von „großen“ Systemen im thermischen Gleichgewicht. Eigentlich gilt sie nur für unendlich große Systeme (*thermodynamischer Limes*), aber für hinreichend große reale Systeme (Zahl der Freiheitsgrade $\gg 1$) liefert sie experimentell gut bestätigte Voraussagen. Die wesentliche Idee der Thermodynamik ist, ein System nicht durch Angabe aller Werte der vielen mikroskopischen Freiheitsgrade zu beschreiben, was weder möglich noch von Interesse ist, sondern durch einige wenige *Zustandsgrößen*. Diese Beschränkung ist i.A. nur möglich, wenn sich das System im Gleichgewicht befindet. Systeme außerhalb des Gleichgewichts sind oft nicht homogen, so dass wir schon deshalb solch eine einfache Beschreibung nicht erwarten. Die Zustandsgrößen beziehen sich auf *makroskopische* Eigenschaften. Systemspezifische Beziehungen zwischen den Zustandsgrößen heißen *Zustandsgleichungen*; sie sind nicht im Rahmen der Thermodynamik herleitbar, sondern ergeben sich als phänomenologische Beschreibung von Systemen oder aus der Statistischen Physik. Aufgabe der Thermodynamik ist es, allgemein gültige Relationen zwischen Zustandsgrößen herzuleiten, sowie abgeleitete Größen, z.B. Antwortfunktionen, für spezielle Systeme zu bestimmen.

1.2.2 Flüssigkeiten

Thermodynamische Potentiale

Die *Innere Energie* U ist eine *Zustandsgröße*, da U nicht vom Prozeßverlauf, sondern nur vom Endzustand abhängt. Äquivalent: das Differential dU ist *exakt*. Es ist

$$dU = dQ - dW = T dS - p dV \quad (1.4)$$

(S : Entropie). Die *natürlichen Variablen* von U sind daher S und V : $U = U(S, V)$.

Übergang zu weiteren *thermodynamischen Potentialen* mittels *Legendre-Transformationen*:

$$E = U + pV \quad \text{Enthalpie,} \quad (1.5)$$

$$G = U - TS + pV \quad \text{freie Enthalpie, Gibbs-Potential,} \quad (1.6)$$

$$F = U - TS \quad \text{freie Energie, Helmholtz-Potential.} \quad (1.7)$$

Differentiale:

$$dE = T dS + V dp, \quad (1.8)$$

$$dG = -S dT + V dp, \quad (1.9)$$

$$dF = -S dT - p dV. \quad (1.10)$$

Daraus folgen

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_V, \quad p = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S \quad \text{usw.} \quad (1.11)$$

Unter Ausnutzung der Vertauschbarkeit von Ableitungen erhält man die *Maxwell-Relationen*

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_S = \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S} = - \left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V \quad (1.12)$$

usw. Alle vier Zustandsgrößen (Potentiale) U , E , G , F als Funktion ihrer natürlichen Variablen enthalten dieselbe Information, z.B.

$$U = F + TS = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -T^2 \left(\frac{\partial}{\partial T} \frac{F}{T} \right)_V. \quad (1.13)$$

Antwortfunktionen

Wir führen nun wichtige (statische) Antwortfunktionen (*response functions*) ein:

(a) Die *spezifische Wärme* (korrekter: Wärmekapazität) bei konstantem Druck (*isobar*) oder konstantem Volumen (*isochor*):

$$C_V = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V, \quad (1.14)$$

$$C_p = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_p. \quad (1.15)$$

(b) Die *Kompressibilität* bei konstanter Temperatur (*isotherm*) oder konstanter Entropie (*adiabatisch, isentrop*):

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2} \right)_T, \quad (1.16)$$

$$\kappa_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial p^2} \right)_S. \quad (1.17)$$

(c) Den *thermischen Ausdehnungskoeffizienten*:

$$\alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p. \quad (1.18)$$

Die Antwortfunktionen sind nicht unabhängig, z.B. kann man aus obigen Beziehungen herleiten, dass

$$\kappa_T(C_p - C_V) = TV\alpha_p^2, \quad (1.19)$$

$$C_p(\kappa_T - \kappa_S) = TV\alpha_p^2. \quad (1.20)$$

Damit das System stabil ist, müssen C und κ positiv sein $\Rightarrow C_p \geq C_V$ und $\kappa_T \geq \kappa_S$.

1.2.3 Ferromagnetika

In Analogie zur Flüssigkeit. Die meisten Ausdrücke ergeben sich durch die Ersetzungen

$$V \rightarrow -M, \quad p \rightarrow H \quad (1.21)$$

M : Magnetisierung (eigentlich gesamtes magnetisches Moment; Magnetisierung ist $m = M/V$), H : Magnetfeld. Das Minuszeichen erscheint, da z.B. $\partial M/\partial H > 0$, während $\partial V/\partial p < 0$. Es ergeben sich:

$$E = U - MH \quad \text{Enthalpie,} \quad (1.22)$$

$$G = U - TS - MH \quad \text{freie Enthalpie, Gibbs-Potential,} \quad (1.23)$$

$$F = U - TS \quad \text{freie Energie, Helmholtz-Potential.} \quad (1.24)$$

Differentiale:

$$dU = T dS + H dM \quad \text{etc.} \quad (1.25)$$

Die Maxwell-Relationen usw. ergeben sich dann sofort. Weiter sind die spezifischen Wärmen

$$C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_M, \quad (1.26)$$

$$C_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_H. \quad (1.27)$$

Anstelle der Kompressibilitäten führt man die *Suszeptibilitäten* ein:

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = - \left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_T, \quad (1.28)$$

$$\chi_S = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_S = - \left(\frac{\partial^2 E}{\partial H^2} \right)_S. \quad (1.29)$$

Die wichtigere, da experimentell leichter zugängliche, ist die *isotherme* Suszeptibilität χ_T . Mit

$$\alpha_H = \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \quad (1.30)$$

ergibt sich

$$\chi_T(C_H - C_M) = T\alpha_H^2, \quad (1.31)$$

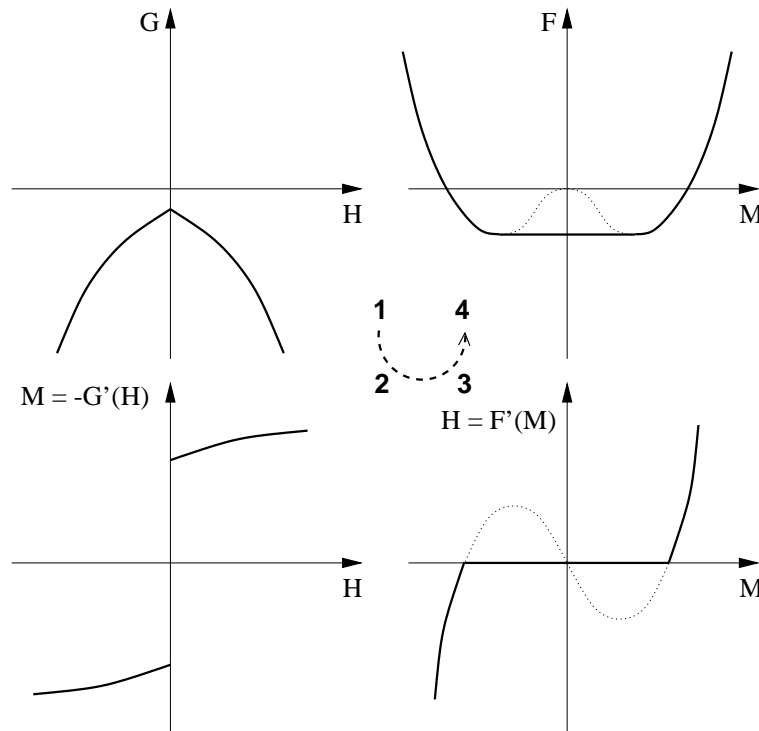
$$C_H(\chi_T - \chi_S) = T\alpha_H^2. \quad (1.32)$$

1.2.4 Geometrische Interpretation

Am Beispiel des Ferromagneten: Man kann zeigen, dass G eine *konkave* Funktion von H bzw. p sein muss, z.B.

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_T = -\chi_T \leq 0 \quad (1.33)$$

Geometrische Interpretation für $T < T_c$:



Vom Gibbs-Potential $G(H)$ (hat eine Spitze bei $H = 0$) $\rightarrow M(H) \rightarrow H(M)$ (triviale Umkehrung) \rightarrow Freie Energie $F(M)$. Beachte: $F(M)$ ist konstant zwischen $-M_0$ und $+M_0$ (Gleichgewichtswerte z.B. aus der Landau-Theorie). Die z.B. in der Statistischen Physik berechnete freie Energie hat typischerweise den Verlauf der gepunkteten Kurve. Die „wahre“ freie Energie hat dagegen tatsächlich den Verlauf der dicken Kurve; zwischen $-M_0$ und M_0 gibt es Koexistenz von Domänen mit entgegengesetzter Magnetisierung $\pm M_0$. Da Energien von Phasengrenzen (Domänenwänden) vernachlässigt wurden, ändert sich die freie Energie hier nicht.

1.2.5 Ordnung von Phasenübergängen

In Anlehnung an Ehrenfest (Proc. Acad. Science Amst. **36**, 153 (1933)):

Bei einem Phasenübergang n -ter Ordnung ist eine n -te Ableitung eines thermodynamischen Potentials nach einer natürlichen Variable *unstetig* und alle entsprechenden Ableitungen der Ordnungen $n' < n$ sind *stetig*.

Beispiele:

1. Siedetübergang für $T < T_c$ unter konstantem Druck. $dG = -S dT \Rightarrow S = -(\partial G/\partial T)_p$. Entropie macht einen Sprung um ΔS („Gas ist weniger geordnet“), d.h. Phasenübergang erster Ordnung. Äquivalent $\Delta Q = T \Delta S \neq 0 \Rightarrow$ latente Wärme.
2. Superfluider Übergang von ${}^4\text{He}$ unter konstantem Druck. Man findet S stetig, aber senkrechte Tangente bei T_c , und $C_p = T(\partial S/\partial T)_p$ divergiert logarithmisch. Phasenübergang zweiter Ordnung.
3. Superfluider ${}^4\text{He}$ -Film auf z.B. Graphit. Nach der *Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Theorie* (siehe 7.5) ist G bei T_c beliebig oft differenzierbar. Dennoch findet ein Phasenübergang statt, der demnach von der Ordnung ∞ ist.

1.3 Kritische Exponenten

1.3.1 Allgemeine Definition

Gegeben sei eine Funktion $f(\epsilon)$, die für hinreichend kleine $\epsilon > 0$ stetig sei und für die der Grenzwert

$$\lambda = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\ln f(\epsilon)}{\ln \epsilon} \quad (1.34)$$

existiere. Dann ist λ der zu der Funktion $f(\epsilon)$ gehörende *kritische Exponent*. Man schreibt $f(\epsilon) \sim \epsilon^\lambda$ für $0 < \epsilon \ll 1$. ϵ kann z.B. $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ sein.

- krit. Exponenten oft experimentell leichter zugänglich als die vollständige ϵ -Abhängigkeit von f ; z.B. aus log-log-Darstellung von f gegen ϵ
- krit. Exponenten bestimmen das *kritische Verhalten*, d.h. hinreichend nah am Phasenübergang (2. Ordnung) vollständig – divergente Größen dominieren über stetige
- gleichartige Phasenübergänge in verschiedenen Materialien (z.B. in Ferromagneten mit verschiedenen Curie-Temperaturen) und sogar Phasenübergänge unterschiedlicher physikalischer Natur zeigen oft *dieselben* krit. Exponenten – weist auf verborgene Gemeinsamkeiten hin
- es existieren zahlreiche Beziehungen zwischen verschiedenen Exponenten

Zwei Phasenübergänge mit denselben kritischen Exponenten gehören zu derselben *Universalitätsklasse*. (Man sagt dann auch, dass die jeweiligen Systeme zu derselben Universalitätsklasse gehören.)

Exponent $\lambda = 0$ kann bedeuten (weitere Angaben nötig):

- $f(\epsilon) \sim a + b\epsilon^{\lambda^*}$ (und *kann* einen Sprung bei $\epsilon = 0$ haben)
- $f(\epsilon) \sim -a \ln \epsilon$

1.3.2 Spezielle Exponenten

(a) Dichte/Magnetisierung. Siehe (T, ρ) - und (T, M) -Projektionen in 1.1: für $T < T_c$ und $T \approx T_c$

$$\rho_{\text{fl}}(T) - \rho_{\text{gas}}(T) \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta, \quad (1.35)$$

$$M(T) \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta. \quad (1.36)$$

(b) Spezifische Wärme:

$$C_V \sim \begin{cases} (1 - T/T_c)^{-\alpha'} & \text{für } T < T_c, \rho = \rho_{\text{fl}} \text{ oder } \rho_{\text{gas}} \\ (T/T_c - 1)^{-\alpha} & \text{für } T > T_c, \rho = \rho_c, \end{cases} \quad (1.37)$$

$$C_H \sim \begin{cases} (1 - T/T_c)^{-\alpha'} & \text{für } T < T_c, H = 0 \\ (T/T_c - 1)^{-\alpha} & \text{für } T > T_c, H = 0. \end{cases} \quad (1.38)$$

(c) Kompressibilität/Suszeptibilität:

$$\kappa_T \sim \begin{cases} (1 - T/T_c)^{-\gamma'} & \text{für } T < T_c, \rho = \rho_{\text{fl}} \text{ oder } \rho_{\text{gas}} \\ (T/T_c - 1)^{-\gamma} & \text{für } T > T_c, \rho = \rho_c, \end{cases} \quad (1.39)$$

$$\chi_T \sim \begin{cases} (1 - T/T_c)^{-\gamma'} & \text{für } T < T_c, H = 0 \\ (T/T_c - 1)^{-\gamma} & \text{für } T > T_c, H = 0. \end{cases} \quad (1.40)$$

(d) Druck/Feld für $T = T_c$:

$$p - p_c \sim \text{sign}(\rho - \rho_c) |\rho/\rho_c - 1|^\delta \quad \text{für } T = T_c, \quad (1.41)$$

$$H \sim |M|^\delta \quad \text{für } T = T_c. \quad (1.42)$$

Weitere Exponenten, die mit der Korrelationsfunktion zusammenhängen, werden in 4.2.4 eingeführt.

1.3.3 Ungleichungen

Zwischen den krit. Exponenten bestehen eine Reihe von *exakten* Beziehungen, die die Form von Ungleichungen annehmen. Sie folgen allgemein aus Stabilitätseigenschaften und der Positivität gewisser Antwortfunktionen. Wir beweisen hier nur eine: Aus $\chi_T(C_H - C_M) = T\alpha_H^2$ und der Bedingung $C_M \geq 0$ ergibt sich

$$C_H \geq \frac{T}{\chi_T} \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H^2. \quad (1.43)$$

Nah am Phasenübergang gilt $C_H \sim (-\epsilon)^{-\alpha'}$, $\chi_T \sim (-\epsilon)^{-\gamma'}$, $(\partial M/\partial T)_H \sim (-\epsilon)^{\beta-1}$, wobei $\epsilon = (T - T_c)/T_c$. Eingesetzt ergibt sich

$$(-\epsilon)^{-\alpha'} \geq T(-\epsilon)^{2(\beta-1)+\gamma'}, \quad (1.44)$$

Für $\epsilon \rightarrow 0^-$ muß daher gelten

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2. \quad (1.45)$$

Dies ist die *Rushbrooke-Ungleichung*. Die Erfahrung deutet darauf hin, dass sie sogar als *Gleichung* gilt, siehe Skalentheorie in 7.1.1.

Eine andere wichtige Ungleichung ist die *Griffiths-Ungleichung* (ohne Beweis)

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) \geq 2. \quad (1.46)$$

Die meisten weiteren Ungleichungen erfordern bei der Herleitung plausible Zusatzannahmen. Wir diskutieren diese Ungleichungen hier nicht weiter, vgl. Stanley.

1.3.4 Weitere Bemerkungen

In *endlichen* Systemen treten *keine* Singularitäten in den thermodynamischen Potentialen oder ihren Ableitungen auf \rightarrow kein wirkliches kritisches Verhalten. *Es gibt in endlichen Systemen keine Phasenübergänge*. In hinreichend großen Systemen macht sich die Endlichkeit jedoch nur extrem nah am kritischen Punkt bemerkbar.

Quanteneffekte sind nahe an Phasenübergängen bei endlichen Temperaturen irrelevant. Grund: die damit verknüpften Längenskalen bleiben endlich (divergieren nur in der Nähe von *quantenkritischen Punkten* bei $T = 0$, so dass sie das kritische Verhalten nicht beeinflussen.

Kapitel 2

Landau-Theorie

2.1 Allgemeines

Die *Landau-Theorie* der Phasentübergänge beschreibt viele Systeme sehr gut, außer in einem sehr schmalen kritischen Bereich um den Phasentübergang – dort sind *Fluktuationen* wesentlich. Fluktuationen sind in der Landau-Theorie *vernachlässigt*. Dennoch hat sie Vorzüge:

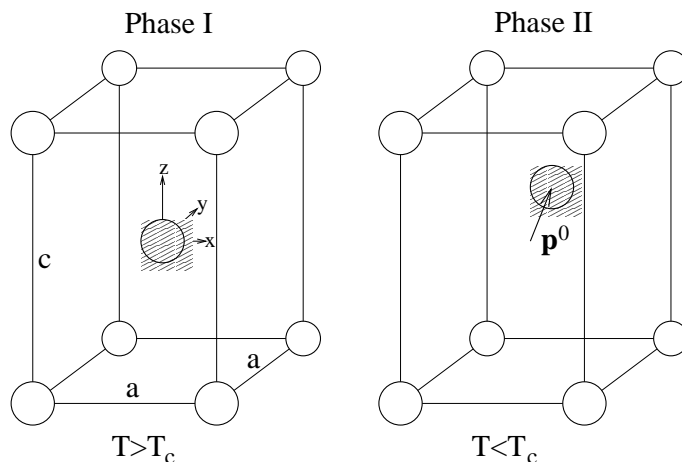
- kritischer Bereich mit Fluktuationen meist sehr schmal
- elegante Diskussion von Symmetrie-Effekten (exakt)
- Beschreibung komplizierter Systeme durch einfachere *effektive Theorie*
- diese effektive Theorie dient als Ausgangspunkt für Behandlung von Fluktuationen (siehe Kap. 4) z.B. mittels Renormierungsgruppen-Theorie (siehe Kap. 7)

Für eine detaillierte gruppentheoretische Diskussion siehe Tolédano und Tolédano.

2.2 Ein ferroelektrisches Modellsystem

2.2.1 Das Modell und seine Symmetrien

Wir diskutieren die Landau-Theorie anhand eines Beispiels, die Verallgemeinerung ist offensichtlich. Nach Tolédano und Tolédano betrachten wir einen Kristall mit tetragonaler Symmetrie:



Für $T > T_c$ (*ungeordnete Phase*, Phase I) befindet sich ein positives Ion im Mittelpunkt der Einheitszelle, deren Ecken die negativen Ionen bilden. Für $T < T_c$ (*geordnete Phase*, Phase II) ist das positive Ion in beliebiger Richtung verschoben. Dann hat jede Einheitszelle ein Dipolmoment $\mathbf{p}^0 = (p_x^0, p_y^0, p_z^0)$.

Die Menge der Drehungen, Spiegelungen, Inversionen (nur eine mögliche), Dreh-Spiegelungen und Inversions-Spiegelungen, die die Einheitszelle invariant lassen, bilden die *Punktgruppe* des Kristalls. Es handelt sich um eine *Gruppe* (abgeschlossen, assoziativ), die i.A. nicht abelsch (kommutativ) ist. Phase I: z -Achse ist vierfache Rotationsachse, x - und y -Achsen sind zweifache Rotationsachsen, 5 Spiegelebenen, Inversion und Identität – und Produkte davon, ergibt 16 Elemente, Gruppe

$G_0 = D_{4h}$ oder $4/mmm$. Phase II: Symmetrie (abhängig von der Richtung von \mathbf{p}^0 , siehe Tolédano und Tolédano) ist erniedrigt – die verbleibenden Symmetrien bilden eine *Untergruppe* $G \subset G_0$.

Der Zustand im *thermischen Gleichgewicht* ist derjenige, in dem das relevante thermodynamische Potential minimal wird (globales Minimum!). Dort sei $\mathbf{p} = \mathbf{p}^0$. Bei gegebener Temperatur T und gegebenem Druck P müssen wir die *freie Enthalpie* (Gibbs-Potential) $G(T, P, \mathbf{p})$ verwenden.

2.2.2 Entwicklung des thermodynamischen Potentials

Wesentliche Idee: Man kennt das Potential $G(T, P, \mathbf{p})$ i.A. nicht in geschlossener Form. Was kann man dennoch über die Funktion $G(T, P, \mathbf{p})$ in der Nähe des Phasenübergangs

- unter der Annahme, dass sich G dort in eine Taylor-Reihe in T, P, \mathbf{p} entwickeln läßt
- unter Berücksichtigung der Symmetrien der Phasen

aussagen? Zunächst betrachten wir kontinuierliche Übergänge, d.h. $\mathbf{p}^0(T, P)$ ist stetig am Phasenübergang $\Rightarrow p_i$ ist klein.

Symmetrie: am Übergang ist $\mathbf{p}^0 = 0 \Rightarrow$ System hat volle Symmetrie G_0 der Phase I. Auslenkungen \mathbf{p} müssen die Symmetrie respektieren, z.B. $\mathbf{p} = (p, 0, 0)$, $(-p, 0, 0)$ und $(0, p, 0)$ bewirken dieselbe Änderung ΔG . Grund: die resultierenden Kristalle gehen durch globale Transformationen (Drehungen, Spiegelungen oder Inversion) ineinander über. Allgemein:

Das Potential, hier G , muß invariant unter allen Elementen der Symmetriegruppe G_0 der ungeordneten Phase sein. Da sich die Ordnung eines Termes in \mathbf{p} unter Symmetrieeoperationen nicht ändert, kommen in der Taylor-Entwicklung von G um $\mathbf{p} = 0$ nur Terme vor, die unter G_0 invariant sind.

Bis zur zweiten Ordnung:

$$G(T, P, \mathbf{p}) = \tilde{G}(T, P) + \sum_i a_i(T, P) p_i + \sum_{ij} b_{ij}(T, P) p_i p_j \quad (2.1)$$

- $a_i = 0$ wegen Spiegelsymmetrie (keine linearen Terme)
- $b_{ij} = 0, i \neq j$ wegen Spiegelsymmetrie
- $b_{xx} = b_{yy}$ wegen Rotationssymmetrie

Also:

$$G(T, P, \mathbf{p}) = \tilde{G}(T, P) + \frac{\alpha_{xy}}{2} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{\alpha_z}{2} p_z^2. \quad (2.2)$$

Mögliche Gleichgewichtszustände:

α_{xy}	α_z	\mathbf{p}^0
> 0	> 0	$(0, 0, 0)$
> 0	< 0	$(0, 0, p_z^0)$
< 0	> 0	$(p_x^0, p_y^0, 0)$
< 0	< 0	(p_x^0, p_y^0, p_z^0)

Für $\alpha_i < 0$ werden *höhere Terme* benötigt, damit G endlich bleibt. Phasenübergänge finden bei *Nulldurchgängen* $\alpha_i = 0$ statt. Symmetrie-Argumente geben keine Beziehung zwischen α_{xy} und $\alpha_z \rightarrow$ betrachte α_{xy}, α_z als unabhängige Funktionen von $(T, P) \Rightarrow \alpha_{xy}$ und α_z verschwinden nicht gleichzeitig, außer an einzelnen *singulären Punkten* (T_s, P_s) .

Die Landau-Theorie betrachtet nur nicht-singuläre Übergänge. Wir diskutieren den Übergang bei der höchsten Temperatur, d.h. aus der ungeordneten Phase I in eine geordnete Phase. Bei T_c ist dann *ein* $\alpha_i = 0$, das andere > 0 . Die zu $\alpha_i = 0$ gehörende(n) Komponente(n) sind $p_i^0 = 0$ für $T > T_c$ und $p_i^0 \neq 0$ für $T < T_c$. Wir nennen sie den *Ordnungsparameter* des Phasenübergangs. Die übrigen Komponenten sind im Gleichgewicht Null für $T < T_c$ und $T \geq T_c$, sie heißen *irrelevant* und werden zunächst vernachlässigt.

- Fall 1: $\alpha_{xy} > 0, \alpha_z = 0$ bei $T = T_c$, Ordnungsparameter (p_x^0, p_y^0)
- Fall 2: $\alpha_{xy} = 0, \alpha_z > 0$ bei $T = T_c$, Ordnungsparameter p_z^0

2.2.3 Ordnungsparameter p_z^0

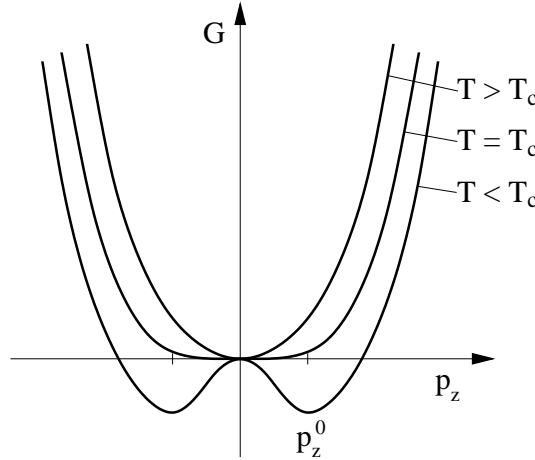
Vernachlässige (p_x, p_y) , entwickle bis zur 4. Ordnung unter Beachtung der Symmetrie:

$$G(T, P, p_z) = \tilde{G}(T, P) + \frac{\alpha(T, P)}{2} p_z^2 + \frac{\beta(T, P)}{4} p_z^4. \quad (2.3)$$

Entwickle \tilde{G} , α , β in T um T_c (unterdrücke P -Abhängigkeit): in führender Ordnung $\tilde{G}(T) = \tilde{G} = \text{const}$, $\alpha(T) = a(T - T_c)$, $\beta(T) = \beta = \text{const}$, dann

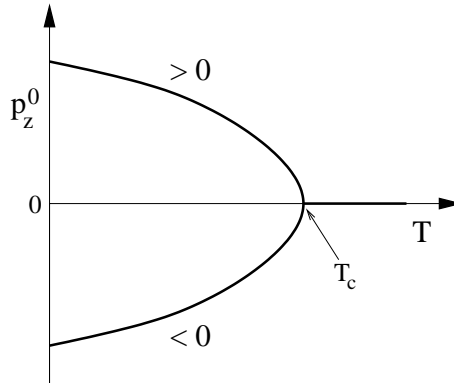
$$G = \tilde{G} + \frac{a}{2}(T - T_c) p_z^2 + \frac{\beta}{4} p_z^4. \quad (2.4)$$

Damit G endlich bleibt, muss $\beta > 0$ sein.



$G(p_z)$ in Abhängigkeit von T . Für $T < T_c$ ist im Gleichgewicht

$$p_z^0 = \pm \sqrt{\frac{a(T_c - T)}{\beta}}. \quad (2.5)$$



Abhängigkeit des Ordnungsparameters von der Temperatur: Quadratwurzel-Verhalten. Vgl. Magnetisierung des Ferromagneten $m(T)$ in 1.1.2.

Nun führen wir das *konjugierte Feld* zu p_z^0 ein, hier das elektrische Feld E_z , was das Potential

$$A = \tilde{G} + \frac{a}{2}(T - T_c) p_z^2 + \frac{\beta}{4} p_z^4 - E_z p_z \quad (2.6)$$

ergibt (durch *Legendre-Transformation*). Man sagt, ein nicht verschwindendes konjugiertes Feld *bricht die Symmetrie explizit*. Weitere Bemerkungen:

(a) Zweifache *Entartung* des Gleichgewichtszustands (\pm). Die beiden Zustände gehen durch Symmetrieeoperationen aus G_0 ineinander über. Während $G(\mathbf{p})$ die volle Symmetrie G_0 hat, ist das für die Gleichgewichtszustände für $T < T_c$ nicht der Fall – sie haben *niedrigere* Symmetrie \rightarrow *spontane Symmetriebrechung*. Die Gleichgewichtszustände für $T < T_c$ sind invariant unter einer

kleineren Symmetriegruppe (Untergruppe) $G \subset G_0$, die z.B. Rotationen um die z -Achse enthält, nicht aber die Inversion.

(b) Verschwinden der latenten Wärme:

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_P = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P, p_z} - \left(\frac{\partial G}{\partial p_z} \right)_{T, P} \left(\frac{\partial p_z}{\partial T} \right)_P, \quad (2.7)$$

da jedoch $(\partial G / \partial p_z)_{T, P} = 0$ für $p_z = p_z^0$, gilt im Gleichgewicht

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P, p_z = p_z^0} = - \frac{a}{2} (p_z^0)^2 - \left(\frac{\partial \tilde{G}}{\partial T} \right)_P. \quad (2.8)$$

Da p_z^0 bei $T = T_c$ stetig ist (kontinuierlicher Übergang!) und der zweite Term ebenfalls stetig ist (hat nichts mit dem Übergang zu tun), ist S bei $T = T_c$ stetig $\Rightarrow \Delta S = 0 \Rightarrow$ keine latente Wärme, $\Delta Q = 0$.

(c) Anomalie in der spezifischen Wärme: Bei konstantem Ordnungsparameter (d.h. variablem konjugiertem Feld)

$$C_{p_z^0} = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_{p_z^0} = -T \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial T^2}, \quad (2.9)$$

da α_z linear in T . Also ist $C_{p_z^0}$ stetig bei T_c . Dieser Fall mit konstantem Ordnungsparameter ist jedoch physikalisch nicht sehr relevant. Die spezifische Wärme bei konstantem Feld $E_z = 0$ ist

$$C_{E_z} = -T \frac{\partial^2 \tilde{G}}{\partial T^2} =: C_{E_z}^0 \quad \text{für } T > T_c \quad (2.10)$$

und

$$C_{E_z} = C_{E_z}^0 - T \left[\frac{a}{2} (T - T_c) \frac{\partial^2 (p_z^0)^2}{\partial T^2} + a \frac{\partial (p_z^0)^2}{\partial T} + \frac{\beta}{4} \frac{\partial^2 (p_z^0)^4}{\partial T^2} \right] \quad \text{für } T < T_c. \quad (2.11)$$

Mit $(p_z^0)^2 = a(T_c - T)/\beta$ ergibt sich

$$C_{E_z} = C_{E_z}^0 + \frac{a^2}{2\beta} T_c + \mathcal{O}(T_c - T). \quad (2.12)$$

In C_{E_z} ergibt sich ein Sprung um $-a^2 T_c / 2\beta$ bei $T = T_c$ (die spezifische Wärme für $T < T_c$ ist größer). Die spezifische Wärme divergiert nicht, also sind die kritischen Exponenten $\alpha = \alpha' = 0$. Dasselbe gilt natürlich für die spezifische Wärme $c = C/m$.

(d) Anomalie in der Suszeptibilität: Wir definieren in Analogie zu 1.2.3

$$\chi_T = \left(\frac{\partial p_z^0}{\partial E_z} \right)_{T, E_z=0}. \quad (2.13)$$

Durch Minimierung von $G(p_z)$ findet man

$$[a(T - T_c) + \beta(p_z^0)^2] p_z^0 = E_z, \quad (2.14)$$

und nach Ableitung nach E_z bei $E_z = 0$:

$$[2\beta p_z^0 \chi_T] p_z^0 + [a(T - T_c) + \beta(p_z^0)^2] \chi_T = [a(T - T_c) + 3\beta(p_z^0)^2] \chi_T = 1. \quad (2.15)$$

Also:

$$\chi_T = \begin{cases} \frac{1}{a(T - T_c)} & \text{für } T > T_c \\ \frac{1}{2a(T_c - T)} & \text{für } T < T_c. \end{cases} \quad (2.16)$$

Die Suszeptibilität *divergiert* bei $T = T_c$ mit den kritischen Exponenten $\gamma = \gamma' = 1$.

2.2.4 Ordnungsparameter (p_x^0, p_y^0)

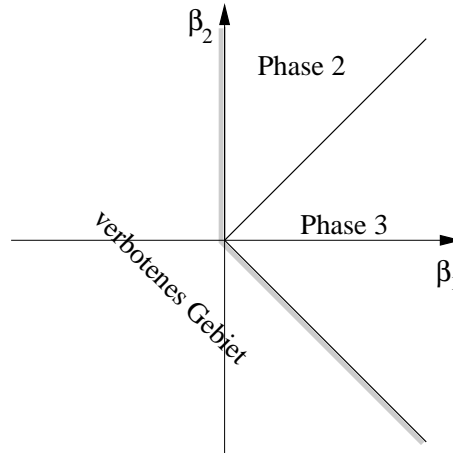
Die allgemeinste mit der Symmetriegruppe G_0 verträgliche Form der freien Enthalpie ist bis zur vierten Ordnung

$$G = \tilde{G} + \frac{\alpha}{2} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{\beta_1}{4} (p_x^4 + p_y^4) + \frac{\beta_2}{2} p_x^2 p_y^2. \quad (2.17)$$

Die erlaubte Form $(p_x^2 + p_y^2)^2$ ist eine Linearkombination von $p_x^4 + p_y^4$ und $p_x^2 p_y^2$. Wir setzen wieder $\alpha = a(T - T_c)$ und die übrigen Parameter konstant. $\beta_1 \neq \beta_2$ außer an singulären Punkten. Man findet folgende Fälle:

1. Für $\alpha > 0$ ist $p_x^0 = p_y^0 = 0$, also $T > T_c$.
2. Für $\alpha < 0$ und $\beta_1 < \beta_2$ existieren vier entartete Minima bei $(p_x^0, p_y^0) = (0, \pm\sqrt{-\alpha/\beta_1})$ und $(p_x^0, p_y^0) = (\pm\sqrt{-\alpha/\beta_1}, 0)$.
3. Für $\alpha < 0$ und $\beta_1 > \beta_2$ existieren vier entartete Minima bei $(p_x^0, p_y^0) = \pm(1, 1)\sqrt{-\alpha/(\beta_1 + \beta_2)}$ und $(p_x^0, p_y^0) = \pm(1, -1)\sqrt{-\alpha/(\beta_1 + \beta_2)}$.

Allgemein seien $\beta_1 > 0$ und $\beta_1 + \beta_2 > 0$, damit $G(p_x, p_y)$ stabil ist.



Zustand des Systems für $T < T_c$ in Abhängigkeit von β_1, β_2 .

- (a) Die geordneten Zustände sind jeweils vierfach entartet.
- (b) Die latente Wärme verschwindet wie oben.
- (c) Die spezifische Wärme macht einen Sprung wie oben.
- (d) Suszeptibilitäten: Wir betrachten den Fall $\beta_1 < \beta_2$ (Phase 2 für $T < T_c$). Das konjugierte Feld ist (E_x, E_y) . Die Suszeptibilität ist der *Tensor*

$$\chi_{ij} = \left(\frac{\partial p_i^0}{\partial E_j} \right)_{T, \mathbf{E}=0}. \quad (2.18)$$

Man findet:

$$\chi_{xx} = \chi_{yy} = \frac{1}{a(T - T_c)}, \chi_{xy} = \chi_{yx} = 0 \quad \text{für } T > T_c, \quad (2.19)$$

$$\chi_{xx} = \frac{1}{2a(T_c - T)}, \chi_{yy} = \frac{\beta_1}{\beta_2 - \beta_1} \frac{1}{a(T_c - T)}, \chi_{xy} = \chi_{yx} = 0 \quad \text{für } T < T_c, p_x^0 \neq 0, p_y^0 = 0. \quad (2.20)$$

Im geordneten Zustand ist die Rotationssymmetrie um die z -Achse spontan gebrochen. Daher sind die Antworten auf Störungen parallel (*longitudinal*) bzw. senkrecht (*transversal*) zur ausgezeichneten Richtung (des Ordnungsparameters) i.A. verschieden.

2.2.5 Sekundäre Ordnungsparameter

Bei einem Phasenübergang der hier diskutierten Art werden sich die Abmessungen (a, a, c) der Einheitszelle i.A. auch ändern. Zur Illustration nehmen wir an, dass sich c ebenfalls ändert. Daher müssen wir ein thermodynamisches Potential betrachten, das auch von c abhängt: $G = G(T, \mathbf{p}, c)$.

Die Form von G nah am Übergang ergibt sich wieder aus Symmetrie-Argumenten. Die Terme, die von c , aber nicht von \mathbf{p} abhängen, lauten:

$$G_c = \lambda'_1 c + \frac{\lambda'_2}{2} c^2 + \frac{\lambda'_3}{3} c^3 + \mathcal{O}(c^4). \quad (2.21)$$

Alle Potenzen sind erlaubt, weil jeder Wert von c mit der Symmetriegruppe G_0 verträglich ist! Aus $\partial G_c / \partial c = 0$ ergibt sich der Gleichgewichtswert $c = c_0$ bei $T = T_c$. Entwickle $c = c_0 + \delta c \Rightarrow$

$$G_c = \frac{\lambda_2}{2} \delta c^2 + \frac{\lambda_3}{3} \delta c^3 + \mathcal{O}(\delta c^2) \quad (2.22)$$

(plus stetige Funktion $\rightarrow \tilde{G}$).

Ebenso: jede Kombination von Potenzen von δc (oder c) mit invarianten Polynomen der p_i ist invariant. Der resultierende Mischterm niedrigster Ordnung ist

$$G_{\text{mix}} = [\mu_1(p_x^2 + p_y^2) + \mu_2 p_z^2] \delta c. \quad (2.23)$$

Bei $T = T_c$ sollte sich c (und damit δc) stetig ändern, ebenso wie \mathbf{p}^0 . Für kleine δc :

$$0 = \frac{\partial G}{\partial \delta c} = \lambda_2 \delta c + \mu_1[(p_x^0)^2 + (p_y^0)^2] + \mu_2 (p_z^0)^2, \quad (2.24)$$

also

$$\delta c = -\frac{1}{\lambda_2} (\mu_1[(p_x^0)^2 + (p_y^0)^2] + \mu_2 (p_z^0)^2). \quad (2.25)$$

Also ist δc ein *Ordnungsparameter*, da $\delta c = 0$ für $T > T_c$ und $\delta c \neq 0$ für $T < T_c$. Wir nennen δc einen *sekundären Ordnungsparameter*. Unterscheidung:

- p_z^0 oder (p_x^0, p_y^0) ist der *primäre* Ordnungsparameter, da der Koeffizient des quadratischen Terms α_z bzw. α_{xy} bei $T = T_c$ verschwindet.
- δc ist ein *sekundärer* Ordnungsparameter, da der Koeffizient des quadratischen Terms λ_2 bei $T = T_c$ endlich bleibt. δc ist nur Ordnungsparameter aufgrund der Kopplungsterme: für $\mu_1 = \mu_2 = 0$ wäre $\delta c = 0$ auch für $T < T_c$.

Bemerkung: sekundäre Ordnungsparameter wie $\delta c \neq 0$ reduzieren die Symmetrie der Phasen nicht weiter. Mit anderen Worten: die Form des thermodynamischen Potentials bleibt unverändert. Die Beschränkung der Landau-Theorie auf das Verhalten eines Ordnungsparameters ist daher erlaubt.

Die Temperaturabhängigkeit von δc ergibt sich aus $(p_x^0)^2 + (p_y^0)^2 \sim T_c - T$ bzw. $(p_z^0)^2 \sim T_c - T$ zu

$$\delta c \sim T_c - T. \quad (2.26)$$

Sie ist *schwächer* als die des primären Ordnungsparameters. Man kann zeigen, dass die Suszeptibilität von δc , d.h. die Änderung von δc mit *seinem* konjugierten Feld nur einen Sprung, keine Singularität aufweist. Allgemein sind die Beiträge sekundärer Ordnungsparameter bei $T \approx T_c$ weniger stark divergent als die der primären \rightarrow vernachlässigbar bei Bestimmung kritischer Exponenten usw.

2.3 Das klassische ferromagnetische Heisenberg-Modell

2.3.1 Darstellung des Modells

Wir betrachten kurz die Landau-Theorie für das ferromagnetische Heisenberg-Modell. Neu ist hier die *kontinuierliche* Symmetrie des Modells. Betrachte ein beliebiges d -dimensionales Gitter aus Spins, die durch dreikomponentige Vektoren \mathbf{S}_i repräsentiert werden. Die Hamilton-Funktion lautet:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{J}_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \dots \quad (2.27)$$

Das Modell ist invariant gegenüber beliebigen Drehungen und Spiegelungen *aller* Spins. Die entsprechende Symmetriegruppe bezeichnet man als $O(3)$. Die Symmetrie ist *global*, da alle Spins zugleich transformiert werden müssen. Die Gruppe $O(3)$ ist *kontinuierlich* (Gegensatz: *diskret*), da

jede geeignet definierte Umgebung eines Elementes weitere Elemente enthält. $O(3)$ ist weiterhin eine *Lie-Gruppe*, d.h. zugleich Gruppe und Vektorraum.

Das relevante thermodynamische Potential im Gleichgewicht ist die freie Energie

$$F(T, \mathbf{M}) = \tilde{F} + \frac{J}{2} \mathbf{M} \cdot \mathbf{M} + \dots \quad (2.28)$$

mit dem Ordnungsparameter $\mathbf{M} := \langle \mathbf{S}_i \rangle$. In der geordneten Phase ist $J < 0$. Wir benötigen wieder höhere Terme zur Stabilisierung. Alle erlaubten Terme bis zur vierten Ordnung lauten

$$F = \tilde{F} + \frac{J}{2} \mathbf{M} \cdot \mathbf{M} + \frac{J'}{4} (\mathbf{M} \cdot \mathbf{M})^2. \quad (2.29)$$

Beachte: Terme wie $|\mathbf{M}|^3$ treten nicht auf, obwohl sie mit der Symmetrie vereinbar sind, weil sie in der Taylor-Reihe gar nicht vorkommen!

Der Gleichgewichtszustand ist

$$\mathbf{M} = \begin{cases} 0 & \text{für } T > T_c \text{ } (J > 0) \\ \sqrt{-J/J'} & \text{für } T < T_c \text{ } (J < 0). \end{cases} \quad (2.30)$$

Für $T < T_c$ ist die $O(3)$ -Symmetrie spontan gebrochen. Der Gleichgewichtszustand ist *unendlichfach entartet* \rightarrow es existieren infinitesimale Transformationen von einem Gleichgewichtszustand in einen anderen. Da sich die Energie dabei nicht ändert, erwarten wir wesentliche *Fluktuationseffekte*, siehe 4.4.

Der Gleichgewichtszustand hat noch immer Rotationssymmetrie um die durch \mathbf{M} ausgezeichnete Achse (und Spiegelsymmetrie bzgl. aller Ebenen, die diese Achse enthalten). Die reduzierte Symmetriegruppe ist $O(2) \subset O(3)$ (Untergruppe).

[Ein sehr ähnliches Modell enthält die zusätzliche *Nebenbedingung (constraint)* $|\mathbf{S}_i| = \text{const}$, die Konstante kann zu eins gewählt werden. Das symmetrie-erlaubte thermodynamische Potential hängt dann gar nicht von \mathbf{M} ab. Nach der Landau-Theorie ist das Modell immer geordnet – erst Fluktuationen machen es interessant. Es hat dieselben Symmetrie-Eigenschaften wie das vorige. Dieses Modell nennt man oft ebenfalls Heisenberg-Modell.]

2.3.2 Kritische Exponenten

Mit der natürlichen Annahme $J \sim T - T_c$ und $J' = \text{const}$ erhält man:

$$|\mathbf{M}| \sim \sqrt{T_c - T}, \quad (2.31)$$

also ist der Exponent $\beta = 1/2$.

Mit dem konjugierten Feld \mathbf{H} ergibt sich analog zu 2.2.3 $\gamma = \gamma' = 1$.

Zur Bestimmung des Exponenten aus δ setzen wir $T = T_c$:

$$F = \tilde{F} + \frac{J'}{4} (\mathbf{M} \cdot \mathbf{M})^2 - \mathbf{H} \cdot \mathbf{M}. \quad (2.32)$$

Ableitung nach \mathbf{M} ergibt

$$|\mathbf{H}| \sim |\mathbf{M}|^3 \quad \Rightarrow \quad \delta = 3. \quad (2.33)$$

2.4 Zusammenfassung der kritischen Exponenten gemäß der Landau-Theorie

Ganz allgemein ergibt die Landau-Theorie die folgenden Exponenten:

$$\alpha = \alpha' = 0, \quad (2.34)$$

$$\beta = 1/2, \quad (2.35)$$

$$\gamma = \gamma' = 1, \quad (2.36)$$

$$\delta = 3. \quad (2.37)$$

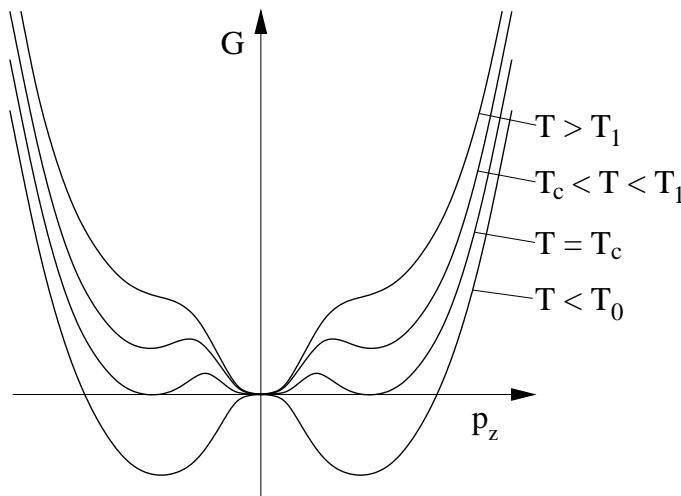
2.5 Übergänge erster Ordnung in der Landau-Theorie

2.5.1 Übergänge mit Ordnungsparameter bei instabilem Term vierter Ordnung

Wir betrachten wieder das ferroelektrische Modellsystem mit dem Ordnungsparameter p_z^0 . Nun sei jedoch der Term vierter Ordnung in der Taylor-Entwicklung *negativ* (instabil). Dann benötigen wir höhere Terme zur Stabilisierung. Der einfachste symmetrie-erlaubte Fall ist

$$G = \tilde{G} + \frac{a}{2}(T - T_0)p_z^2 + \frac{\beta}{4}p_z^4 + \frac{\gamma}{6}p_z^6 \quad (2.38)$$

mit $\beta < 0, \gamma > 0$.



Gibbs-Potential für einen Übergang erster Ordnung mit Ordnungsparameter.

- bei T_0 (Vorzeichenwechsel von α) findet *kein* Übergang statt
- dieser findet bei $T_c > T_0$ statt, wo die Minima von G *entartet* sind – bei T_c *springt* der Ordnungsparameter p_z^0 von 0 auf einen endlichen Wert
- bei einer dritten charakteristischen Temperatur $T_1 > T_c$ verschwinden die lokalen Minima in G bei endlichen p_z
- für *alle* $T_0 < T < T_1$ existieren mehrere lokale Minima, d.h. *metastabile* Zustände (Beispiel: Diamant/Graphit) \rightarrow *Koexistenzgebiet*, mögliche Existenz von *Hysterese*

Allgemein:

- Ordnungsparameter existiert und macht einen Sprung (Problem: nicht allgemein klein für $T < T_c$, quantitative Ergebnisse fragwürdig)
- Symmetriegruppen erfüllen Untergruppenrelation $G \subset G_0$

2.5.2 Andere Typen von Übergängen erster Ordnung

Wir betrachten kurz drei Typen (siehe Tolédano und Tolédano).

Übergänge mit Ordnungsparameter und einem Term dritter Ordnung

Z.B. beim Übergang von nematischen Flüssigkristallen in die isotrope Phase. Ein Gibbs-Potential der Form

$$G = \tilde{G} + \frac{a}{2}(T - T_0)\phi^2 - \frac{w}{3}\phi^3 + \frac{\beta}{4}\phi^4 \quad (2.39)$$

ist nicht invariant unter $\phi \rightarrow -\phi$. Es führt allgemein zu einem Übergang erster Ordnung, wo das einzige lokale Minimum bei $\phi \neq 0$ zum globalen Minimum wird. Der Tieftemperaturzustand ist nicht entartet.

Übergänge mit mehreren Ordnungsparametern

Starke Kopplung zwischen zwei Ordnungsparametern, die eigentlich zwei getrennte Übergänge zweiter Ordnung beschreiben \rightarrow simultaner Übergang erster Ordnung. Im ferroelektrischen Beispiel-Modell: starke (symmetrie-erlaubte) *biquadratische* Kopplung

$$\mu_3(p_x^2 + p_y^2)p_z^2 \quad (2.40)$$

mit $\mu_3 < 0$.

Die Ordnungsparameter p_z^0 und (p_x^0, p_y^0) gehören zu zwei verschiedenen Untergruppen $G[p_z^0]$ und $G[p_x^0, p_y^0]$ der Symmetriegruppe G_0 . Die Symmetriegruppe der Tieftemperatur-Phase bei simultanem Übergang ist $G[p_z^0] \cap G[p_x^0, p_y^0]$.

Übergänge ohne Ordnungsparameter

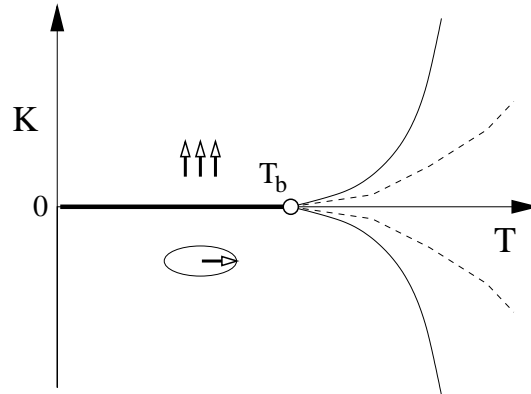
V.a. bei strukturellen Übergängen kommt es vor, dass keine Untergruppenbeziehung zwischen den Symmetriegruppen für $T < T_c$, $T > T_c$ besteht. Dann existiert nicht offensichtlich ein Ordnungsparameter. Wichtigster Fall: Die beiden Phasen haben Symmetriegruppen $G_1, G_2 \subset G^*$, wobei die Phase mit der Gruppe G^* nicht realisiert sein muss.

2.6 Multikritische Punkte

Allgemein:

An einem n -kritischen Punkt ($n = \text{bi-}, \text{tri-}, \text{tetra-}$ etc.) im Phasendiagramm treffen sich n Linien von kontinuierlichen Übergängen und evtl. beliebige Übergänge erster Ordnung.

(a) Bikritische Punkte. Ein typisches Beispiel tritt im anisotropen Ferromagneten auf:

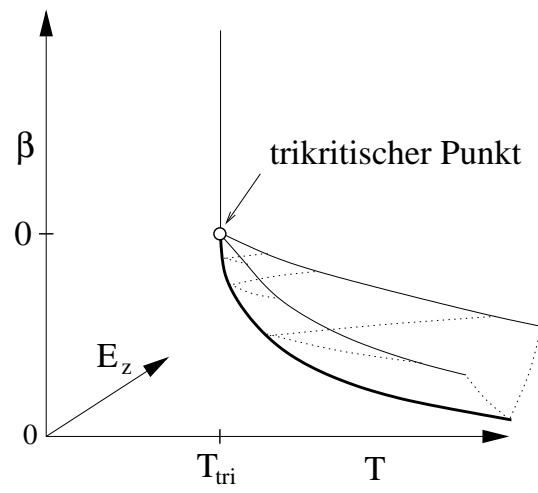


Bei T_b existiert ein bikritischer Punkt, an dem zwei Linien von Übergängen zweiter Ordnung enden. K ist die uniaxiale Anisotropie ($-KS_z^2$). Gestrichelte Linien sind *cross overs*: für höhere Temperaturen hat man isotropes kritisches Verhalten, für tiefere anisotropes.

(b) Trikritische Punkte. Z.B. im uniaxialen Antiferromagneten oder in unserem ferroelektrischen Modell-System:

$$G = \tilde{G} + \frac{a}{2}(T - T_0)p_z^2 + \frac{\beta}{4}p_z^4 + \frac{\gamma}{6}p_z^6, \quad (2.41)$$

$\gamma > 0$ (vgl. 2.5.1), aber nun mit β als zusätzlichem Kontrollparameter. Offenbar findet bei $\beta = 0$ eine qualitative Änderung statt.



Phasendiagramm im Raum (T, β, E_z) , vgl. Aufg. A.2.3. Am trikritischen Punkt bei T_{tri} treffen sich drei Linien zweiter Ordnung zusammen, sowie eine erster Ordnung, an der drei Ebenen erster Ordnung zusammenstoßen.

Kapitel 3

Molekularfeld-Theorien

In der Landau-Theorie haben wir gesehen, wie man aus der Kenntnis der *Symmetrien* der Phasen thermodynamische Potentiale konstruieren und daraus, unter Vernachlässigung von Fluktuationen, thermodynamische Eigenschaften von Systemen ermitteln kann. In der Landau-Theorie kann man die Potentiale jedoch nicht *herleiten* (man kann nicht vorhersagen, welcher Ordnungsparameter relevant ist oder welche Werte die Koeffizienten annehmen). Für diese Herleitung bedarf es *mikroskopischer* Theorien, am einfachsten *Molekularfeld-Theorien* (mean field theories), die ebenfalls Fluktuationen vernachlässigen. Allgemeine Schritte in Molekularfeld-Theorien:

- ersetze geeignete Freiheitsgrade durch ihren Mittelwert (*Molekularfeld, effektives Feld*)
- löse das resultierende Problem exakt
- bestimme das Molekularfeld selbstkonsistent

Wir diskutieren kurz zwei Beispiele.

3.1 Weiß'sche Theorie des Ferromagnetismus

3.1.1 Effektives Feld

Gegeben sei ein System (lokalisierter oder beweglicher) Spins mit dem Hamiltonian

$$H = - \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}') - g\mu_B \mathbf{H} \cdot \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}(\mathbf{r}) \quad (\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'). \quad (3.1)$$

Die $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ sind Spin-Operatoren. Man kann auch schreiben:

$$H = -g\mu_B \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{H}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{H}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H} + \frac{1}{g\mu_B} \sum_{\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{S}(\mathbf{r}'). \quad (3.3)$$

\mathbf{H}_{eff} ist ein Operator. Idee der Molekularfeld-Theorie: ersetze \mathbf{H}_{eff} durch seinen thermischen Mittelwert \rightarrow *effektives Feld = Molekularfeld*

$$\langle \mathbf{H}_{\text{eff}} \rangle = \mathbf{H} + \frac{1}{g\mu_B} \sum_{\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \mathbf{S} \rangle. \quad (3.4)$$

D.h. jeder Spin wechselwirkt nur mit dem Mittelwert aller anderen. Translationsinvarianz von $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ sowie Darstellung von $\langle \mathbf{S} \rangle$ durch die Magnetisierung (im Sinne der Elektrodynamik),

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{V}{N} \frac{\mathbf{M}}{g\mu_B}, \quad (3.5)$$

(\mathbf{M} ist hier der *Ordnungsparameter*), ergeben

$$\langle \mathbf{H}_{\text{eff}} \rangle = \mathbf{H} + \lambda \mathbf{M} \quad \text{mit} \quad (3.6)$$

$$\lambda = \frac{V}{N(g\mu_B)^2} \sum_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r}). \quad (3.7)$$

Der Molekularfeld-Hamiltonian ist

$$H_{\text{mf}} = -g\mu_B \langle \mathbf{H}_{\text{eff}} \rangle \cdot \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}(\mathbf{r}) \quad (3.8)$$

(die Spins wechselwirken nicht mehr direkt, sondern nur noch über das effektive Feld).

3.1.2 Quantisierter Spin im Magnetfeld

Wir berechnen den Erwartungswert der Magnetisierung im effektiven Feld über das Gibbs-Potential $G(T, H)$. Die Gesamtspin-Quantenzahl sei S . Wähle Quantisierungsachse in Feldrichtung.

$$Z(T, H) = e^{-\beta G} = \sum_{m=-S}^S e^{-\beta g\mu_B H m} = \frac{e^{\beta g\mu_B H(S+1/2)} - e^{-\beta g\mu_B H(S+1/2)}}{e^{\beta g\mu_B H/2} - e^{-\beta g\mu_B H/2}} \quad (3.9)$$

($\beta = 1/k_B T$, m : magnetische Quantenzahl). Die Magnetisierung ist

$$M = -\frac{N}{V} \left(\frac{\partial G}{\partial H} \right)_T = \frac{N}{V} g\mu_B S B_S(\beta g\mu_B S H) \quad (3.10)$$

mit den *Brillouin-Funktionen*

$$B_S(x) := \frac{2S+1}{2S} \coth \frac{(2S+1)x}{2S} - \frac{1}{2S} \coth \frac{x}{2S}. \quad (3.11)$$

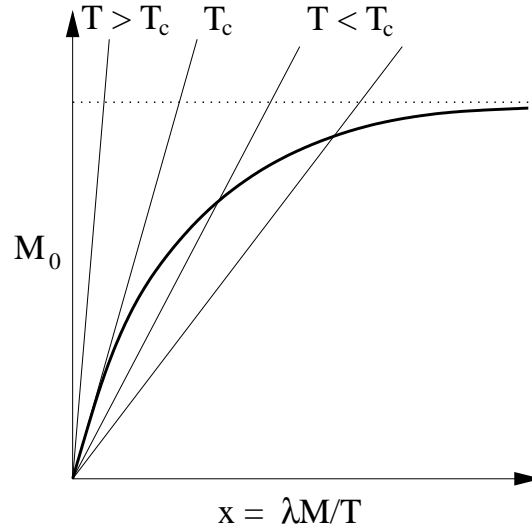
Also hier

$$M = \frac{N}{V} g\mu_B S B_S(\beta g\mu_B S H_{\text{eff}}) \equiv M_0 \left(\frac{H_{\text{eff}}}{T} \right). \quad (3.12)$$

Wir suchen die *spontane* Magnetisierung ($\mathbf{H} = 0$):

$$M = M_0 \left(\frac{\lambda M}{T} \right) \quad (3.13)$$

→ Bestimmungsgleichung für M – löse graphisch das System $M = M_0(x)$ und $M = Tx/\lambda$ durch Aufsuchen der Schnittpunkte:



- für $T \geq T_c$ nur eine Lösung $M = 0$
- für $T < T_c$ auch nichttriviale Lösung mit $M > 0$
- für $T \rightarrow 0$ ist $M = N/V g\mu_B S \Rightarrow \langle S_z \rangle = S$

Bestimme T_c aus $M'_0(0) = T/\lambda$.

$$M'_0(0) = T \left(\frac{\partial M}{\partial H_{\text{eff}}} \right)_{T, H_{\text{eff}}=0} = \frac{T}{\lambda}, \quad (3.14)$$

also

$$1 = \lambda \chi_T = \frac{S(S+1)}{3k_B T_c} \sum_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r}) \quad (3.15)$$

$$\Rightarrow T_c = \frac{S(S+1)}{3k_B} \sum_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r}). \quad (3.16)$$

Unterhalb von T_c ergibt sich in führender Ordnung

$$M \sim (T_c - T)^{1/2} \quad (3.17)$$

(der bekannte Landau-Exponent $\beta = 1/2$).

3.1.3 Diskussion

Die Weiß'sche Theorie gilt am besten für

- hohe Koordinationszahl (fcc-Gitter besser als bcc)
- hohe Dimensionszahl des Raumes (3D besser als 2D)
- hohe Dimensionszahl des Ordnungsparameters (Heisenberg-Modell besser als XY-Modell)
- geringe Unordnung

Sie versagt

- bei der Beschreibung von Anregungen (Spinwellen)
- falls Fluktuationen dominant sind, insbesondere
- im kritischen Bereich (z.B. Berechnung von Exponenten)

3.2 BCS-Theorie der Supraleitung

Supraleitung ist gekennzeichnet durch

- verlustfreie Stromleitung
- Verdrängung des Magnetfeldes (Meißner-Effekt)

In konventionellen Supraleitern (Nb, Ta, Al, Pb usw.) wird sie gut durch die *Bardeen-Cooper-Schrieffer-Theorie* (BCS-Theorie) beschrieben, die wir kurz betrachten wollen.

Wir gehen aus vom *attraktiven Hubbard-Modell*, das Elektronen auf einem Gitter mit lokaler attraktiver Wechselwirkung beschreibt. Der Hamilton-Operator lautet in zweiter Quantisierung:

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} = t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \quad (3.18)$$

(der erste Term beschreibt Hüpfen zwischen benachbarten Plätzen; σ ist der Elektronenspin, $U > 0$). Wir haben einen Beitrag in $c^{\dagger} c$ vernachlässigt – verschiebt nur die Gesamtenergie. Die Molekularfeld-Näherung besteht in

$$c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \cong \langle c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} \rangle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle - \langle c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} \rangle \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle. \quad (3.19)$$

Wir definieren das „Molekularfeld“ (*Ordnungsparameter*)

$$\Delta := U \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle \quad (3.20)$$

und erhalten

$$H_{\text{mf}} = t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \sum_i \left(\Delta^* c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} \Delta \right) + \frac{\mathcal{N}}{U} \Delta^* \Delta, \quad (3.21)$$

wobei $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ die Zahl der Gitterplätze ist. Wir gehen zu Fourier-transformierten Elektronen-Operatoren über und führen das chemische Potential μ ein:

$$H_{\text{mf}} = \frac{\mathcal{N}}{U} \Delta^* \Delta + a^3 \int d^3 k \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta \\ -\Delta^* & -\epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

mit $\epsilon_{\mathbf{k}} := 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) - \mu$. Wir nehmen an, dass Δ reell ist, da ein globaler Phasenfaktor irrelevant sein sollte. Dann diagonalisieren wir H_{mf} mittels der *Bogoliubov-Valatin-Transformation*

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}}\psi_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \quad (3.23)$$

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow} = u_{\mathbf{k}}\psi_{-\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}}\psi_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \quad (3.24)$$

($u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$). $\psi_{\mathbf{k}\sigma}$ erzeugt eine Anregung, die aus Teilchen und Löchern superponiert ist. Dann ist

$$H_{\text{mf}} = \frac{\mathcal{N}}{U}\Delta^2 + a^2 \int d^3k \left(\psi_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, \psi_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \times \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}}[u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2] + 2\Delta u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} & 2\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} - \Delta[u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2] \\ 2\epsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} - \Delta[u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2] & -\epsilon_{\mathbf{k}}[u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2] - 2\Delta u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \psi_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

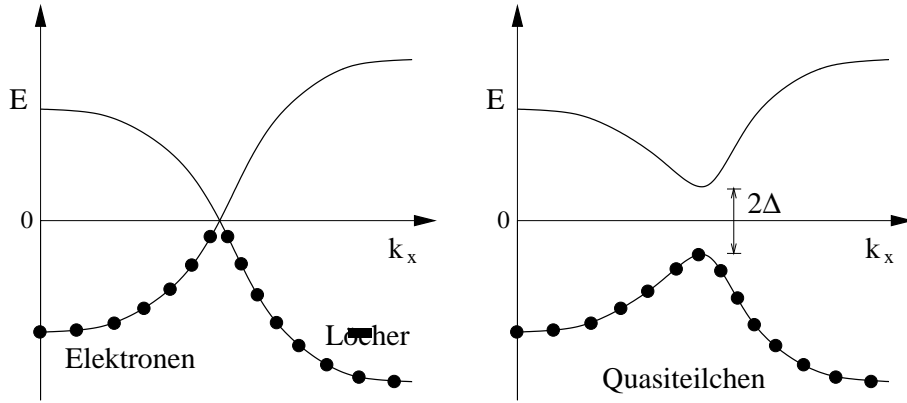
H_{mf} wird diagonal, wenn

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}} \quad (3.26)$$

$$v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}} \quad (3.27)$$

mit $E_{\mathbf{k}} = (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}$, denn dann ist

$$H_{\text{mf}} = \frac{\mathcal{N}}{U}\Delta^2 + a^2 \int d^3k \left(\psi_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, \psi_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \psi_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$



Quasiteilchen- ($\psi_{\mathbf{k}\sigma}$) Dispersion im Supraleiter.

Die innere Energie lautet

$$E = \frac{\mathcal{N}}{U}\Delta^2 + \sum_{\mathbf{k}} [E_{\mathbf{k}}f(E_{\mathbf{k}}) - E_{\mathbf{k}}f(-E_{\mathbf{k}})] = \frac{\mathcal{N}}{U}\Delta^2 - \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} [1 - 2f(E_{\mathbf{k}})] \quad \text{mit (3.29)}$$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta E} + 1}. \quad (3.30)$$

Wir bestimmen nun das Molekularfeld $\Delta(T)$ aus

$$0 = \left(\frac{\partial E}{\partial \Delta} \right)_S. \quad (3.31)$$

Beachte, dass die Entropie $S = -2k_B \sum_{\mathbf{k}} [f \ln f + (1 - f) \ln(1 - f)]$ nur ein Funktional von $f(E)$ ist, daher gilt auch

$$0 = \left(\frac{\partial E}{\partial \Delta} \right)_f = \frac{2\mathcal{N}}{U}\Delta - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}} [1 - 2f(E_{\mathbf{k}})] \quad (3.32)$$

oder

$$\Delta = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} U \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} [1 - 2f(E_{\mathbf{k}})] = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} U \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}, \quad (3.33)$$

dies ist die berühmte *BCS-Gap-Gleichung* (beachte $U > 0$). Durch Entwicklung findet man $\Delta \sim (T_c - T)^{1/2}$, wie erwartet.

Kapitel 4

Fluktuationen

4.1 Zustandssumme und thermodynamische Potentiale

Zur Wiederholung: Das makroskopische Verhalten eines Systems wird vollständig durch seine Zustandssumme (*partition function*) Z beschrieben. Im kanonischen Ensemble (T, N gegeben) ist

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}. \quad (4.1)$$

\sum_i summiert über alle möglichen Zustände, i kann diskret oder kontinuierlich sein. Für Quantensysteme schreibt man auch:

$$Z = \sum_i \langle i | e^{-\beta H} | i \rangle \equiv \text{Tr} e^{-\beta H}, \quad (4.2)$$

H ist der Hamiltonian.

Sei A eine beliebige Observable, die im Zustand i den Wert A_i annimmt, dann ist ihr Mittelwert

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} = \frac{1}{Z} \sum_i A_i e^{-\beta E_i}. \quad (4.3)$$

Ist B das konjugierte Feld zu A , d.h. $H[A] = H_0[A] - AB$, so gilt

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z. \quad (4.4)$$

Ist weiter B' konjugiert zu einer Observablen A' , so ist

$$\langle AA' \rangle = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B \partial B'}. \quad (4.5)$$

Die innere Energie ist

$$U = \langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad (4.6)$$

im Flüssigkeit-Gas-System also $U(S, V) = -(\partial \ln Z(T, V) / \partial \beta)_V$. Für die freie Energie gilt

$$F(T, V) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(T, V). \quad (4.7)$$

Man kann auch für andere Potentiale dazugehörige Zustandssummen angeben, z.B.

$$G(T, p) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(T, p) \quad \text{mit} \quad (4.8)$$

$$Z(T, p) = \sum_i e^{-\beta(E_i + pV_i)}. \quad (4.9)$$

4.2 Grenzen der Landau-Theorie

Fluktuationen bezeichnen Abweichungen $\delta\phi$ eines Ordnungsparameters ϕ von seinem Mittelwert $\langle\phi\rangle$. Beachte, dass $\langle\phi\rangle$ selbst räumlich nicht konstant sein muss, z.B. in einem Ferromagneten im inhomogenen äußeren Feld. Wir betrachten dieses System als Beispiel.

4.2.1 Verallgemeinerte Suszeptibilität

Für den klassischen Ferromagneten definieren wir die *verallgemeinerte Suszeptibilität* bei $T = \text{const}$:

$$\chi_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') := \frac{\delta \langle m_i(\mathbf{x}) \rangle}{\delta h_j(\mathbf{x}')}. \quad (4.10)$$

Dieser Ausdruck enthält eine *Funktionalableitung*, d.h. Ableitungen nach den $3N$ Variablen $\delta h_j(\mathbf{x}')$. $\chi_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ beschreibt die Änderung von \mathbf{m} bei \mathbf{x} aufgrund einer Feldänderung bei \mathbf{x}' .

Im homogenen Feld \mathbf{h} gilt für die freie Energie $dF = -S dT + \mathbf{h} \cdot d\langle \mathbf{m} \rangle$. Im inhomogenen Fall:

$$dF = -S dT + \int d^d x \mathbf{h}(\mathbf{x}) \cdot \delta \langle \mathbf{m}(\mathbf{x}) \rangle \quad (4.11)$$

(betrachte $\langle \mathbf{m}(\mathbf{x}) \rangle$ an jedem \mathbf{x} als unabhängige Variable). Es folgt

$$h_i(\mathbf{x}) = \frac{\delta F}{\delta \langle m_i(\mathbf{x}) \rangle}. \quad (4.12)$$

Das Inverse der Suszeptibilität ist

$$\chi_{ij}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') := \frac{\delta h_i(\mathbf{x})}{\delta \langle m_j(\mathbf{x}') \rangle} = \frac{\delta^2 F}{\delta \langle m_i(\mathbf{x}) \rangle \delta \langle m_j(\mathbf{x}') \rangle}. \quad (4.13)$$

Beachte:

- χ beschreibt Änderung des Ordnungsparameters bei \mathbf{x} durch die Änderung des konjugierten Feldes bei \mathbf{x}' .
- χ ist (auch) in Landau/Molekularfeld-Theorie eine sinnvolle Größe.

4.2.2 Korrelationsfunktionen

Wir definieren allgemein die *Korrelationsfunktion* einer Funktion $\phi(\mathbf{x})$:

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') := \left\langle [\phi(\mathbf{x}) - \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle] [\phi(\mathbf{x}') - \langle \phi(\mathbf{x}') \rangle] \right\rangle \equiv \langle \delta \phi(\mathbf{x}) \delta \phi(\mathbf{x}') \rangle. \quad (4.14)$$

Ohne Fluktuationen, d.h. für $\delta \phi(\mathbf{x}) = 0$, folgt $\mathcal{G} \equiv 0$. Offensichtlich ist

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle \phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}') \rangle - \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle \langle \phi(\mathbf{x}') \rangle. \quad (4.15)$$

Für den Ferromagneten:

$$\mathcal{G}_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle \delta m_i(\mathbf{x}) \delta m_j(\mathbf{x}') \rangle = \langle m_i(\mathbf{x}) m_j(\mathbf{x}') \rangle - \langle m_i(\mathbf{x}) \rangle \langle m_j(\mathbf{x}') \rangle. \quad (4.16)$$

Zur Berechnung verwenden wir die passende Zustandssumme $Z[T, \mathbf{h}(\mathbf{x})]$:

$$\mathcal{G}_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\delta^2 Z}{\delta h_i(\mathbf{x}) \delta h_j(\mathbf{x}')} - \frac{1}{\beta^2 Z^2} \frac{\delta Z}{\delta h_i(\mathbf{x})} \frac{\delta Z}{\delta h_j(\mathbf{x}')}. \quad (4.17)$$

Mit dem Gibbs-Potential $G[T, \mathbf{h}(\mathbf{x})] = -\beta^{-1} \ln Z$ folgt

$$\mathcal{G}_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{\beta} \frac{\delta^2 G}{\delta h_i(\mathbf{x}) \delta h_j(\mathbf{x}')}. \quad (4.18)$$

Also schließlich

$$\mathcal{G}_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{\beta} \frac{\delta \langle m_i(\mathbf{x}) \rangle}{\delta h_j(\mathbf{x}')} = \frac{1}{\beta} \chi_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'). \quad (4.19)$$

Beachte:

- \mathcal{G} beschreibt die Korrelation der Fluktuationen bei \mathbf{x} und \mathbf{x}' .
- sinnlos in Landau/Molekularfeld-Theorie!

Die Korrelationsfunktion \mathcal{G}_{ij} und die Suszeptibilität χ_{ij} sind bis auf einen Faktor $1/\beta = k_B T$ identisch.

Dieser Zusammenhang gilt *allgemein* – wir haben keine spezielle Form von Z , G , F angenommen!

4.2.3 Gradientenentwicklung

Nun verallgemeinern wir die Landau-Theorie für *inhomogene* Ordnungsparameter. Allgemein betrachten wir ein System im inhomogenen konjugierten Feld $j(\mathbf{x}) \rightarrow$ Ordnungsparameter $\phi(\mathbf{x})$ i.A. ebenfalls inhomogen. (Wir lassen die Symbole $\langle \dots \rangle$ nun wieder weg.) Konstruiere nun die thermodynamischen Potentiale. Wir erwarten, dass räumliche Änderungen von ϕ Energie kosten (Ordnungsparameter ist *steif*). Änderungen werden durch den *Gradienten* $\nabla\phi$ beschrieben, also:

- entwickle die thermodynamischen Potentiale in ϕ und $\nabla\phi$,
- berücksichtige nur symmetrie-erlaubte Terme.

Bis zur führenden Ordnung ergibt dies für die freie Energie

$$F[T, \phi(\mathbf{x})] = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{4} \phi^4(\mathbf{x}) + \frac{\gamma}{2} \nabla\phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}) \right] \quad (4.20)$$

und speziell für den klassischen Ferromagneten

$$F[T, \mathbf{m}(\mathbf{x})] = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{4} (\mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{x}))^2 + \frac{\gamma}{2} \nabla_\nu m_i(\mathbf{x}) \nabla_\nu m_i(\mathbf{x}) \right] \quad (4.21)$$

(über doppelte Indizes werde summiert).

4.2.4 Landau-Theorie für Suszeptibilität und Korrelationsfunktion

Ising-Ferromagnet

Wir betrachten den Ferromagneten mit einkomponentiger Magnetisierung $m(\mathbf{x})$ (uniaxial). Dieses Modell ist äquivalent zum bekannten ϕ^4 -Modell mittels der Identifikation $\phi \equiv m$. Die obige freie Energie ergibt

$$\chi^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = (\alpha + 3\beta m^2(\mathbf{x}) - \gamma \nabla \cdot \nabla) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (4.22)$$

(nach partieller Integration – die Funktionalableitungen sind nur unter einem Integral wohldefiniert). Im Feld $h = 0$ ist m nach der Landau-Theorie homogen und nach Einsetzen der *Fourier-Transformierten* der Magnetisierung ergibt sich

$$\chi(\mathbf{q}) = \beta \mathcal{G}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\alpha + 3\beta m^2 + \gamma q^2} \equiv \frac{1}{\gamma} \frac{\xi^2}{1 + q^2 \xi^2} \quad (4.23)$$

mit der typischen Länge oder *Korrelationslänge*

$$\xi = \sqrt{\frac{\gamma}{\alpha + 3\beta m^2}} = \begin{cases} \sqrt{\gamma/\alpha} & \text{für } T > T_c \\ \sqrt{-\gamma/2\alpha} & \text{für } T < T_c. \end{cases} \quad (4.24)$$

$\chi(\mathbf{q})$ hat *Ornstein-Zernike-Form* (benannt nach der ersten Theorie für die Korrelationsfunktion): Lorentz-Kurve, wird zur δ -Funktion bei $T = T_c$.

Also: in der Landau-Theorie kann man die Suszeptibilität berechnen (Gleichgewichtseigenschaft!) und wegen der Identität $\chi = \beta \mathcal{G}$ auch die Korrelationsfunktion der *Fluktuationen*. Dies ist insofern *inkonsistent*, als die Landau-Theorie Fluktuationen gerade vernachlässigt. Die Theorie ist *konsistent*, wenn die so berechneten Fluktuationen klein sind, d.h. hier $|\delta m| \ll m$.

Allgemein definiert man die kritischen Exponenten ν , ν' durch

$$\xi \sim \begin{cases} (1 - T/T_c)^{-\nu'} & \text{für } T < T_c \\ (T/T_c - 1)^{-\nu} & \text{für } T > T_c. \end{cases} \quad (4.25)$$

Also hier: $\nu = \nu' = 1/2$.

Im realen Raum ist \mathcal{G} einfacher zu interpretieren:

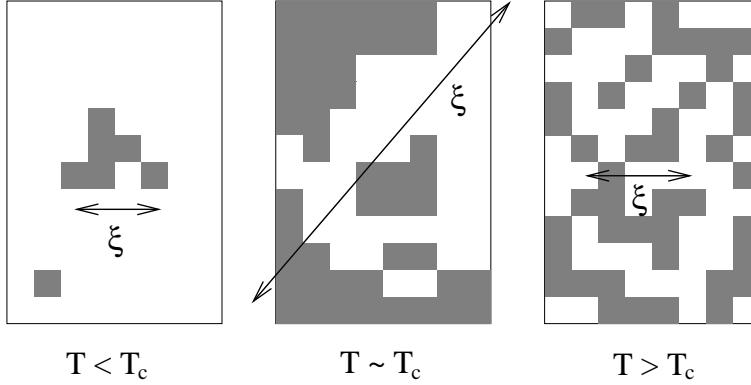
$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{x}) = \beta \mathcal{G}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\gamma |\mathbf{x}|^{d-2}} Y_d(|\mathbf{x}|/\xi) \\ &= \frac{1}{4\pi\gamma |\mathbf{x}|} e^{-|\mathbf{x}|/\xi} \quad \text{für } d = 3. \end{aligned} \quad (4.26)$$

$Y_d(|\mathbf{x}|/\xi)$ fällt exponentiell auf der Längenskala $\xi(T)$ ab. Ausnahme: bei $T = T_c$ ist $\xi = \infty \Rightarrow \mathcal{G}(\mathbf{x}) \sim 1/|\mathbf{x}|^{d-2}$.

Allgemein definiert man den kritischen Exponenten η durch

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) \sim \frac{1}{|\mathbf{x}|^{d-2+\eta}} \quad \text{für } T = T_c. \quad (4.27)$$

Also hier: $\eta = 0$



Zur Verdeutlichung der Korrelationslänge – hier für einen Ordnungsparameter mit zwei möglichen Werten („weiß“ und „grau“).

Heisenberg-Ferromagnet

Für eine dreikomponentige Magnetisierung $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ ergibt sich bei $\mathbf{h} = 0$

$$\chi_{ij}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = (\alpha + \beta \mathbf{m} \cdot \mathbf{m} - \gamma \nabla \cdot \nabla) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{ij} + 2\beta m_i m_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (4.28)$$

und

$$\chi_{ij}^{-1}(\mathbf{q}) = (\alpha + \beta \mathbf{m} \cdot \mathbf{m} + \gamma q^2) \delta_{ij} + 2\beta m_i m_j. \quad (4.29)$$

Wenn $\mathbf{h} = 0$ und \mathbf{m} für $T < T_c$ o.B.d.A. in die 1-Richtung zeigt, so ist

$$\chi_{11}^{-1}(\mathbf{q}) = \alpha + 3\beta m^2 + \gamma q^2 \quad (4.30)$$

$$\chi_{22}^{-1}(\mathbf{q}) = \chi_{33}^{-1}(\mathbf{q}) = \alpha + \beta m^2 + \gamma q^2 \quad (4.31)$$

$$\chi_{ij}^{-1}(\mathbf{q}) = 0 \quad \text{für } i \neq j. \quad (4.32)$$

$\chi_{\parallel} \equiv \chi_{11}$ verhält sich wie beim Ising-Modell, jedoch

$$\chi_{\perp}(\mathbf{q}) \equiv \chi_{22}(\mathbf{q}) = \begin{cases} (\alpha + \gamma q^2)^{-1} & \text{für } T > T_c \\ (\gamma q^2)^{-1} & \text{für } T < T_c. \end{cases} \quad (4.33)$$

Also gilt für *alle* $T < T_c$

$$\mathcal{G}_{\perp}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{\gamma q^2} \quad (4.34)$$

$$\mathcal{G}_{\perp}(\mathbf{x}) \sim \frac{k_B T}{\gamma |\mathbf{x}|^{d-2}}. \quad (4.35)$$

- kritisches (Potenzgesetz-) Verhalten für *alle* $T < T_c$
- direkte Konsequenz aus gebrochener *kontinuierlicher* Symmetrie \rightarrow *weiche* transversale Fluktuationen
- für $d \leq 2$ ist $\mathcal{G}_{\perp}(x \rightarrow \infty) > 0$ – nach Definition von \mathcal{G} muß jedoch $\mathcal{G}_{\perp}(x \rightarrow \infty) = 0$ gelten \rightarrow Widerspruch! Landau-Theorie versagt in 1D und 2D
- für $T \rightarrow 0$ wird $\mathcal{G}_{\perp}(\mathbf{x}) \rightarrow 0$, langreichweitige Ordnung ist für alle d möglich

4.2.5 Ginzburg-Kriterium I

Ein Maß für die Wichtigkeit von Fluktuationen und für die Gültigkeitsgrenze der Landau-Theorie geht auf V.L. Ginzburg zurück. Die Idee des *Ginzburg-Kriteriums* ist folgende:

Wir betrachten die Abweichungen $\delta\phi$ eines Ordnungsparameters vom Mittelwert $\langle\phi\rangle$ (als homogen angenommen). $\delta\phi$ ist i.A. groß, wenn wir sehr kleine Längenskalen $r \ll \xi$ ansehen. Daher mitteln wir $\delta\phi$ über ein Volumen V_ξ des Durchmessers ξ (*Kohärenzvolumen*):

$$\overline{\delta\phi} := \frac{1}{V_\xi} \int_{V_\xi} d^d x \delta\phi(\mathbf{x}). \quad (4.36)$$

Fluktuationen sind zumindest nicht dominant, wenn

$$\langle(\overline{\delta\phi})^2\rangle < \langle\phi\rangle^2, \quad (4.37)$$

(nach Definition ist $\langle\overline{\delta\phi}\rangle = 0$) d.h. wenn

$$\frac{1}{V_\xi^2} \int_{V_\xi} d^d x \int_{V_\xi} d^d x' \langle\delta\phi(\mathbf{x}) \delta\phi(\mathbf{x}')\rangle = \frac{1}{V_\xi} \int_{V_\xi} d^d x \mathcal{G}(\mathbf{x}) < \langle\phi\rangle^2 \quad (4.38)$$

mit der Korrelationsfunktion $\mathcal{G}(\mathbf{x})$. Aus 4.2.4: die Landau-Theorie gibt selbst ein Resultat für \mathcal{G} . Für einen einkomponentigen Ordnungsparameter ϕ (ϕ^4 -Modell) ist

$$\langle(\overline{\delta\phi})^2\rangle = \frac{k_B T}{V_\xi \gamma} \int_{V_\xi} d^d x \frac{1}{|\mathbf{x}|^{d-2}} Y(|\mathbf{x}|/\xi) = \frac{A_d T}{\gamma \xi^{d-2}}, \quad (4.39)$$

wobei A_d eine dimensionsabhängige Konstante ist. Für $T < T_c$ ist nach der Landau-Theorie $\xi = \sqrt{\gamma/2|\alpha|}$ sowie $\langle\phi\rangle = \sqrt{|\alpha|/\beta}$. Wir absorbieren Zahlenfaktoren von der Größenordnung eins in A_d und erhalten für $T \approx T_c$:

$$\frac{A_d T (2|\alpha|)^{d/2-1}}{\gamma^{d/2}} < \frac{|\alpha|}{\beta} \quad (4.40)$$

$$\Rightarrow \frac{A_d}{2\Delta C_V \xi_0^d} < \left(\frac{\xi}{\xi_0}\right)^{d-4} = \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{(4-d)/2} \quad (4.41)$$

mit der Längenskala und dem Sprung in der spezifische Wärme (siehe 2.2.3)

$$\xi_0 := \sqrt{\frac{\gamma}{aT_c}}, \quad \Delta C_V = \frac{a^2}{2\beta} T_c \quad (4.42)$$

(beachte $\alpha = a(T - T_c)$). Ohne Beweis: Das Ginzburg-Kriterium gilt auch für $T > T_c$ in der Form

$$\frac{A_d}{2\Delta C_V \xi_0^d} < \left(\frac{\xi}{\xi_0}\right)^{d-4} = \left(\frac{|T - T_c|}{T_c}\right)^{(4-d)/2}. \quad (4.43)$$

Es gilt auch für Systeme mit mehrkomponentigem Ordnungsparameter, soweit die Korrelationsfunktion \mathcal{G} exponentiell abfällt.

Für hinreichend kleines d wird ξ^{d-4} klein, wenn $T \rightarrow T_c$, während die linke Seite der Ungleichung konstant ist. Fluktuationen sind demnach wichtig nahe bei T_c , und die Landau-Theorie wird hier inkonsistent. Das läßt sich ausdrücken durch die reduzierte *Ginzburg-Temperatur* t_G :

$$t_G := \left(\frac{A_d}{2\Delta C_V \xi_0^d}\right)^{2/(4-d)}. \quad (4.44)$$

Für $|T - T_c| < t_G T_c$ sind Fluktuationen wesentlich.

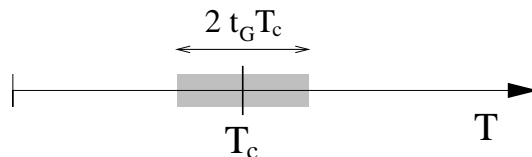


Illustration der Ginzburg-Temperatur t_G .

Beispiel: für den konventionellen Supraleiter Niob ist $T_c = 9,2$ K und $t_G \approx 2 \times 10^{-11}$. Also gilt die (mean-field) BCS-Theorie hervorragend. Für den Hoch- T_c -Supraleiter $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ist hingegen $T_c \approx 92$ K und $t_G \approx 10^{-2}$, der kritische Bereich ist experimentell zugänglich.

Man kann auch eine *Ginzburg-Länge*

$$\xi_G = \xi_0 (\Delta C_V \xi_0^d)^{1/(4-d)} \quad (4.45)$$

einführen. Fluktuationen sind für $\xi > \xi_G$ wichtig (dies ist nur eine Umschreibung des Kriteriums).

Wir sehen auch, dass für einen Phasenübergang erster Ordnung typischerweise Fluktuationen nicht wichtig sein sollten, da ξ nicht divergiert \rightarrow Landau-Theorie gilt, falls sie existiert.

4.2.6 Obere kritische Dimension

Falls ξ durch die Landau-Näherung für die ϕ^4 -Theorie gegeben ist, ergibt sich folgende Abhängigkeit von der Dimensionszahl d :

- $d > 4$: die rechte Seite des Ginzburg-Kriteriums

$$\frac{A_d}{2\Delta C_V \xi_0^d} < \left(\frac{\xi}{\xi_0}\right)^{d-4} \quad (4.46)$$

divergiert für $T \rightarrow T_c$ (von oben oder unten). Die Ungleichung ist daher in der Nähe von T_c immer erfüllt, die Landau-Theorie beschreibt das kritische Verhalten *exakt* \rightarrow exakte kritischen Exponenten.

- $d < 4$: ξ^{d-4} wird klein und es gibt einen *kritischen Bereich* um T_c , in dem die Landau-Theorie versagt \rightarrow da die kritischen Exponenten durch Grenzwerte für $T \rightarrow T_c$ definiert sind, ergeben sich i.A. nicht die exakten Werte. Fluktuationen sind bei geringerer Dimension stärker.
- $d = 4$: unterhalb der *oberen kritischen Dimension* d_c versagt die Landau-Theorie. Für den Ising-Fall ist also $d_c = 4$. Für andere Systeme erwartet man andere Werte von d_c (auch $d_c < 4$). Die obere kritische Dimension kann man schon an der Form

$$\frac{A_d T (2|\alpha|)^{d/2-1}}{\gamma^{d/2}} < \frac{|\alpha|}{\beta} \quad (4.47)$$

ablesen: für $d = d_c = 4$ sind die Exponenten von α auf beiden Seiten gleich.

4.3 Gauß'sche Fluktuationen

Bisher haben wir untersucht, wann die Landau-Theorie aufgrund von Fluktuationen inkonsistent wird. Jetzt wollen wir diese Fluktuationen selbst beschreiben. Die einfachste Näherung über Landau- bzw. Molekularfeld-Theorien hinaus ist die *Gauß'sche Näherung* kleiner Fluktuationen.

Vereinbarung: Der Mittelwert von A in der Landau-Theorie sei \bar{A} .

4.3.1 Allgemeine Formulierung

Betrachte ein System mit N Freiheitsgraden ϕ_i (N kann abzählbar oder überabzählbar sein). Die Energie sei $E(\{\phi_i\})$. Entwickle nun E um das Minimum:

$$E(\{\phi_i\}) \cong E(\{\bar{\phi}_i\}) + \sum_i \frac{\partial E}{\partial \phi_i} (\phi_i - \bar{\phi}_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E}{\partial \phi_i \partial \phi_j} (\phi_i - \bar{\phi}_i)(\phi_j - \bar{\phi}_j) + \mathcal{O}(\{\phi_i\})^3. \quad (4.48)$$

- Berücksichtigung nur der nullten Ordnung: Landau-Theorie
- erste Ordnung fällt weg (Minimum!)
- Entwicklung bis zur zweiten Ordnung: *Gauß'sche Näherung*

Also ist in der Gauß'schen Näherung

$$\beta E(\{\phi_i\}) = \beta E(\{\bar{\phi}_i\}) + \frac{\beta}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E}{\partial \phi_i \partial \phi_j} \delta \phi_i \delta \phi_j \equiv \beta E(\{\bar{\phi}_i\}) + \frac{1}{2} \sum_i \sigma_i^{-2} (\delta \phi_i')^2, \quad (4.49)$$

wo die Matrix $\partial^2 E / \partial \phi_i \partial \phi_j$ durch Transformation auf neue Variablen $\delta \phi'_i$ diagonalisiert wurde. Die Eigenwerte sind σ_i^{-2} . Die Variablen $\delta \phi'_i$ bezeichnen N harmonische Oszillatoren (*Eigenmoden*).

Die Zustandssumme ist nun

$$Z = \int d\phi_1 \dots d\phi_N e^{-\beta E(\{\phi_i\})} \cong \underbrace{e^{-\beta E(\{\bar{\phi}_i\})}}_{Z_0} \int d\delta \phi'_1 \dots d\delta \phi'_N \exp\left(-\sum_i \frac{(\delta \phi'_i)^2}{2\sigma_i^2}\right). \quad (4.50)$$

Beachte: die freie Energie der Landau-Theorie ist $F_0 = -\beta^{-1} \ln Z_0 \equiv E(\{\bar{\phi}_i\})$. Das Integral kann in Integrale über die einzelnen $\delta \phi'_i$ zerlegt werden, die *Gauß'sche Integrale* sind. Diese sind analytisch lösbar nach

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) = \sqrt{2\pi} \sigma. \quad (4.51)$$

Zustandssumme und freie Energie sind dann:

$$Z = Z_0 \prod_i \sqrt{2\pi} \sigma_i, \quad (4.52)$$

$$F = E(\{\bar{\phi}_i\}) - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln \sqrt{2\pi} \sigma_i = E(\{\bar{\phi}_i\}) - \frac{k_B T}{2} \sum_i \ln 2\pi \sigma_i^2. \quad (4.53)$$

Weiter ist

$$\langle \delta \phi'_i \rangle = \frac{Z_0}{Z} \int d\delta \phi'_1 \dots d\delta \phi'_N \phi'_i \prod_i \exp\left(-\frac{(\delta \phi'_i)^2}{2\sigma_i^2}\right) = 0 \quad (4.54)$$

$$\Rightarrow \langle \delta \phi_i \rangle = 0 \quad (4.55)$$

$$\Rightarrow \langle \phi_i \rangle = \bar{\phi}_i, \quad (4.56)$$

$$\langle (\delta \phi'_i)^2 \rangle = \frac{Z_0}{Z} \int d\delta \phi'_1 \dots d\delta \phi'_N \phi'_i \phi'_i \prod_i \exp\left(-\frac{(\delta \phi'_i)^2}{2\sigma_i^2}\right) = \sigma_i^2. \quad (4.57)$$

- Mittelwerte sind weiterhin Werte am Minimum (wie in der Landau-Theorie)
- Schwankungen sind durch die Varianzen σ_i gegeben

4.3.2 Gauß'sche Fluktuationen im ϕ^4 -Modell

Sei $E[\phi(\mathbf{x})]$ die Energie einer beliebigen Konfiguration des reellen Feldes $\phi(\mathbf{x})$. Wir entwickeln E um das Minimum bis zur zweiten Ordnung:

$$\beta E[\phi(\mathbf{x})] \cong \beta E[\bar{\phi}(\mathbf{x})] + \frac{\beta}{2} \int d^d x d^d x' \left. \frac{\delta^2 E}{\delta \phi(\mathbf{x}) \delta \phi(\mathbf{x}')} \right|_{\bar{\phi}(\mathbf{x})} \delta \phi(\mathbf{x}) \delta \phi(\mathbf{x}') \quad (4.58)$$

mit $\delta \phi(\mathbf{x}) := \phi(\mathbf{x}) - \bar{\phi}(\mathbf{x})$. In der Landau-Theorie ist $E[\bar{\phi}(\mathbf{x})] \equiv F_0[\bar{\phi}(\mathbf{x})]$. Also können wir für die zweiten Ableitungen auch schreiben

$$\left. \frac{\delta^2 E}{\delta \phi(\mathbf{x}) \delta \phi(\mathbf{x}')} \right|_{\bar{\phi}(\mathbf{x})} \equiv \frac{\delta^2 F_0}{\delta \bar{\phi}(\mathbf{x}) \delta \bar{\phi}(\mathbf{x}')} = \chi_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{\beta} \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad (4.59)$$

also

$$\beta E[\phi(\mathbf{x})] \cong \beta F_0[\bar{\phi}(\mathbf{x})] + \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta \phi(\mathbf{x}) \delta \phi(\mathbf{x}'). \quad (4.60)$$

Zur Erinnerung: in der ϕ^4 -Theorie ist die inverse Molekularfeld-Korrelationsfunktion

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{k_B T} \left(\alpha + 3\beta \bar{\phi}^2(\mathbf{x}) - \gamma \nabla \cdot \nabla \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (4.61)$$

Fourier-Transformation *diagonalisiert* den $\delta \phi^2$ -Term,

$$\begin{aligned} \beta E[\phi(\mathbf{x})] &\cong \beta F_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q}) |\delta \phi(\mathbf{q})|^2 \\ &= \beta F_0 + \frac{V}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q}) |\delta \phi(\mathbf{q})|^2 \quad \text{mit} \end{aligned} \quad (4.62)$$

$$\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q}) = \beta \gamma \frac{1 + q^2 \xi^2}{\xi^2}. \quad (4.63)$$

(Wir betrachten ein System auf einem Gitter: Summation über erste Brillouin-Zone.)

Die Zustandssumme ist, analog zum vorigen Abschnitt,

$$\begin{aligned}
Z &= Z_0 \prod_{\mathbf{q}} \sqrt{2\pi/\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q})} \\
&= Z_0 \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \ln \frac{2\pi}{\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q})}\right) \\
&= Z_0 \exp\left(-\frac{V}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln \frac{\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q})}{2\pi}\right), \tag{4.64}
\end{aligned}$$

das Ergebnis gilt im Kontinuum. Die freie Energie lautet

$$F = F_0 + \frac{k_B T}{2} V \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln \frac{\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q})}{2\pi} \equiv F_0 + \frac{k_B T}{2} \text{Tr} \ln \frac{\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q})}{2\pi}. \tag{4.65}$$

- dies ist die *one-loop*-Form der freien Energie
- Gauß'sche Fluktuationen werden von der Landau- (Molekularfeld-) Korrelationsfunktion \mathcal{G}_0 kontrolliert

F hängt über F_0 und \mathcal{G}_0 von $\langle\phi(\mathbf{x})\rangle = \bar{\phi}(\mathbf{x})$ ab \longrightarrow daraus *one-loop*-Form der Korrelationsfunktion

$$\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \beta \frac{\delta^2 F}{\delta\langle\phi(\mathbf{x})\rangle \delta\langle\phi(\mathbf{x}')\rangle}. \tag{4.66}$$

In der ungeordneten Phase, $T > T_c$, folgt

$$\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + \frac{1}{2} \text{Tr} \mathcal{G}_0 \frac{\delta^2 \mathcal{G}_0^{-1}}{\delta\langle\phi(\mathbf{x})\rangle \delta\langle\phi(\mathbf{x}')\rangle}. \tag{4.67}$$

In der ϕ^4 -Theorie wird daraus

$$\mathcal{G}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + 3\beta V \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathcal{G}_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \tag{4.68}$$

und schließlich

$$k_B T \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q}) = \underbrace{\alpha + \gamma q^2}_{k_B T \mathcal{G}_0^{-1}} + 3\beta k_B T V \int \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} \frac{1}{\alpha + \gamma(q')^2} \tag{4.69}$$

(β ist hier ein Koeffizient der Landau-Entwicklung). Man erhält eine Korrektur zum konstanten Term α . Der kritischen Exponenten η ($\mathcal{G}(\mathbf{x}) \sim 1/|\mathbf{x}|^{d-2+\eta}$ bei $T \rightarrow T_c^+$) wird davon nicht beeinflusst, also $\eta = 0$ wie in der Landau-Theorie.

Wir berechnen noch die *one-loop*-Korrektur zur spezifischen Wärme für $T > T_c$. Sie lautet $C = -T \partial^2 F / \partial T^2$ mit

$$F = F_0 + \frac{k_B T}{2} \text{Tr} \ln \frac{\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q})}{2\pi} = \frac{k_B T}{2} \text{Tr} \ln \frac{(\alpha + \gamma q^2)}{2\pi k_B T} = \frac{k_B T}{2} \text{Tr} [\ln(\alpha + \gamma q^2) - \ln T + \text{const}]. \tag{4.70}$$

Daher

$$\begin{aligned}
C &= -T \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{k_B}{2} \text{Tr} [\ln(\alpha + \gamma q^2) - \ln T + \text{const}] + \frac{k_B T}{2} \text{Tr} \left[\frac{a}{\alpha + \gamma q^2} - \frac{1}{T} \right] \right) \\
&= -T \left(k_B \text{Tr} \left[\frac{a}{\alpha + \gamma q^2} - \frac{1}{T} \right] - \frac{k_B T}{2} \text{Tr} \left[\frac{a^2}{(\alpha + \gamma q^2)^2} - \frac{1}{T^2} \right] \right) \\
&= \frac{k_B T^2}{2} \text{Tr} \frac{a^2}{(\alpha + \gamma q^2)^2} - k_B T \text{Tr} \frac{a}{\alpha + \gamma q^2} + \frac{k_B}{2} \text{Tr} 1. \tag{4.71}
\end{aligned}$$

Nun ist $\text{Tr} \equiv V \int d^d q / (2\pi)^d$. Nach Einführung von Polarkoordinaten verhalten sich die drei Integranden in C für große q wie q^{d-5} , q^{d-3} bzw. q^{d-1} . Die Integrale divergieren daher für große q (*UV-Divergenz*) wenn $d \geq 4$, $d \geq 2$ bzw. $d \geq 0$: typisches Problem des Kontinuums-Grenzfalls \longrightarrow führe *Abschneideparameter* Λ für große q ein.

Physikalische Interpretation des Abschneideparameters: Fluktuationen auf kleinen Längenskalen $x < \Lambda^{-1}$ sind bereits in den Koeffizienten in den thermodynamischen Potentialen enthalten. Ein minimales Λ^{-1} ergibt sich aus dem atomistischen Aufbau der Materie.

Für *kleine* q sind die Integrale wohldefiniert, *es sei denn* $\alpha = 0$. Die führende *IR-Divergenz* für $\alpha \rightarrow 0^+$ kommt vom ersten Integral. Mit Substitution $Q = q\xi$ wird es zu

$$\frac{k_B T^2 V a^2}{2\xi^d} \int \frac{d^d Q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(\alpha + \gamma Q^2/\xi^2)^2} = \frac{k_B T^2 V a^2}{2\gamma^2} \xi^{4-d} \int \frac{d^d Q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(1 + Q^2)^2} \quad (4.72)$$

da $\xi = \sqrt{\gamma/\alpha}$. Das Integral enthält einen Abschneideparameter $\Lambda\xi \rightarrow \infty$ für $T \rightarrow T_c^+$. Sei $d < 4$, dann ist das Integral für $T \rightarrow T_c^+$ endlich. Also:

$$C \sim \xi^{4-d} \sim (T - T_c)^{(d-4)/2} \quad \text{für } T \rightarrow T_c^+. \quad (4.73)$$

Also ist der kritische Exponent $\alpha = (4 - d)/2$ im ϕ^4 -Modell in Gauß'scher Näherung (Landau-Theorie: $\alpha = 0$).

Für $T < T_c$ ist

$$F = F_0 + \frac{k_B T}{2} \text{Tr} \ln \frac{\mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q})}{2\pi} = F_0 + \frac{k_B T}{2} \text{Tr} \ln \frac{-2\alpha + \gamma q^2}{2\pi k_B T}. \quad (4.74)$$

Wir wissen: F_0 führt zu einem Sprung in C . Im *one-loop*-Term ist einfach $\alpha > 0$ durch $-2\alpha > 0$ ersetzt \rightarrow gleiche T -Abhängigkeit wie für $T > T_c$, Exponent $\alpha' = (4 - d)/2$.

Man kann zeigen: Die übrigen Exponenten haben dieselben Werte wie in der Landau-Theorie.

4.3.3 Ginzburg-Kriterium II

Wir betrachten die Größe $\partial k_B T \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q})/\partial\alpha$ für das ϕ^4 -Modell bei $T > T_c$, wobei α ein Koeffizient der Landau-Entwicklung ist. Unter Vernachlässigung von Fluktuationen ist

$$\frac{\partial k_B T \mathcal{G}_0^{-1}(\mathbf{q})}{\partial\alpha} = \frac{\partial}{\partial\alpha} (\alpha + \gamma q^2) = 1. \quad (4.75)$$

Mit Gauß'schen Fluktuationen ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial k_B T \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q})}{\partial\alpha} &= \frac{\partial}{\partial\alpha} \left(\alpha + \gamma q^2 + 3\beta k_B T V \int \frac{d^d \kappa}{(2\pi)^d} \frac{1}{\alpha + \gamma \kappa^2} \right) \\ &= 1 - 3\beta k_B T V \int \frac{d^d \kappa}{(2\pi)^d} \frac{1}{(\alpha + \gamma \kappa^2)^2} \\ &= 1 - \frac{3\beta}{\gamma^2} k_B T V \int \frac{d^d \kappa}{(2\pi)^d} \frac{1}{(\xi^{-2} + \kappa^2)^2} \end{aligned} \quad (4.76)$$

da $\xi = \sqrt{\gamma/\alpha}$.

(a) Sei zunächst $d < 4$:

$$\int \frac{d^d \kappa}{(2\pi)^d} \frac{1}{(\xi^{-2} + \kappa^2)^2} = \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int_0^\infty d\kappa \frac{\kappa^{d-1}}{(\xi^{-2} + \kappa^2)^2}. \quad (4.77)$$

Wie oben bei der spezifischen Wärme ergibt sich

$$\frac{\partial k_B T \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q})}{\partial\alpha} = 1 - \frac{3\beta}{\gamma^2} k_B T V c_d \xi^{4-d}, \quad (4.78)$$

wo c_d eine d -abhängige Zahl von der Größenordnung 1 ist. Wegen $\xi \propto (T - T_c)^{-1/2}$ ist der Korrekturterm proportional zu $(T - T_c)^{(d-4)/2}$ und divergiert für $T \rightarrow T_c^+$ wenn $d < 4$.

Die Gauß'sche Näherung versagt offenbar, wenn der Korrekturterm von derselben Größenordnung ist, wie der führende (Landau-) Term, d.h. wenn

$$\frac{\beta k_B T}{\gamma^2} \xi^{4-d} \approx 1 \quad \text{oder} \quad (4.79)$$

$$\xi^{d-4} \approx \frac{\beta k_B T}{\gamma^2}. \quad (4.80)$$

Das ist bis auf einen irrelevanten Zahlenfaktor identisch mit

$$\left(\frac{\xi}{\xi_0}\right)^{d-4} = \frac{A_d}{2\Delta C_V \xi_0^d}, \quad (4.81)$$

was wieder das *Ginzburg-Kriterium* ist.

Das Ginzburg-Kriterium beschreibt nicht nur den Zusammenbruch der Landau-Theorie, sondern auch den der Gauß'schen Näherung für die Fluktuationen. Der Bereich um T_c , in dem die Gauß'sche Näherung gut ist, ist höchstens um einen Zahlenfaktor breiter als der Gültigkeitsbereich der Landau-Theorie.

(b) Für $d > 4$ erhält man nie eine Divergenz bei kleinen q , selbst bei $T = T_c$. (Dagegen divergiert das Integral bei *großen* $q \rightarrow$ Abschneideparameter Λ .)

Die Ergebnisse für das Ginzburg-Kriterium und die obere kritische Dimension $d_c = 4$ stimmen mit der Abschätzung in der Landau-Theorie überein. (Wir verzichten auf die Diskussion der geordneten Phase $T < T_c$.)

4.4 Goldstone-Moden und das Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorem

4.4.1 Goldstone-Moden

Einführendes Beispiel: klassisches XY-Modell

Betrachte das XY-Modell mit dem Ordnungsparameter $\mathbf{m} = (m_1, m_2)$ und der Energie ($h = 0$)

$$E = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} m^2(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{4} m^4(\mathbf{x}) + \frac{\gamma}{2} (\nabla_\nu m_i)(\nabla_\nu m_i) \right] \quad (4.82)$$

mit $\alpha = a(T - T_0)$. Fluktuationen sind gegeben durch $\delta m_i = m_i - \overline{m}_i$ (Mittelwert der Landau-Theorie).

(a) Für $T > T_0$ (= Übergangstemperatur in der Landau-Theorie) ist $\overline{\mathbf{m}} = 0$ und daher bis zur zweiten (Gauß'schen) Ordnung:

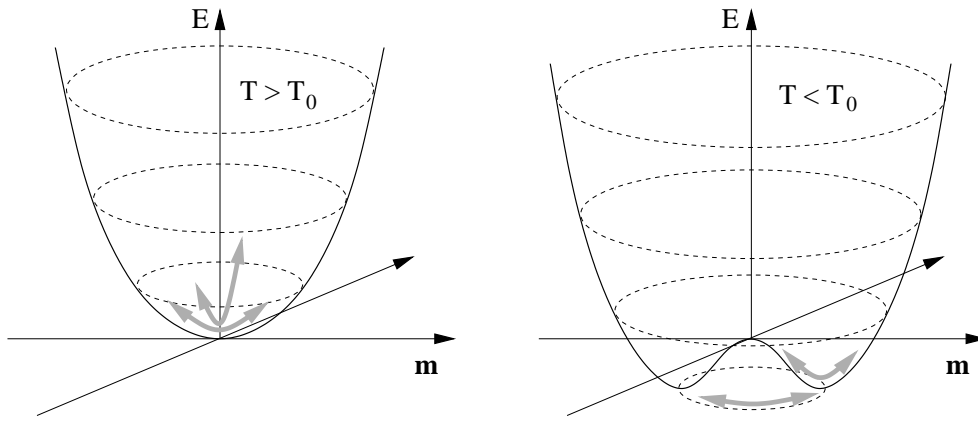
$$E \cong \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} (\delta m_1^2 + \delta m_2^2) + \frac{\gamma}{2} (\nabla \delta m_1 \cdot \nabla \delta m_1 + \nabla \delta m_2 \cdot \nabla \delta m_2) \right]. \quad (4.83)$$

Wir finden zwei Moden mit identischer Energie $\sim (\alpha + \gamma q^2)/2$. Für $q \rightarrow 0$ bleibt die Energie endlich.

(b) Für $T < T_0$ nehmen wir an, dass $\overline{\mathbf{m}} = (\overline{m}, 0) = (\sqrt{-\alpha/\beta}, 0)$,

$$\begin{aligned} E &\cong \text{const} + \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} (2\overline{m}\delta m_1 + \delta m_1^2 + \delta m_2^2) + \frac{\beta}{4} (\overline{m}^2 + 2\overline{m}\delta m_1 + \delta m_1^2 + \delta m_2^2)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma}{2} (\nabla \delta m_1 \cdot \nabla \delta m_1 + \nabla \delta m_2 \cdot \nabla \delta m_2) \right] \\ &\cong \text{const} + \int d^d x \left[-\alpha \delta m_1^2 + \frac{\gamma}{2} (\nabla \delta m_1 \cdot \nabla \delta m_1 + \nabla \delta m_2 \cdot \nabla \delta m_2) \right]. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Wir finden zwei Moden mit den Energien $\sim (-\alpha + \gamma q^2/2)$ und $\sim \gamma q^2/2$. Die zweite kostet keine Energie für $q \rightarrow 0$. Dies ist die Eigenschaft einer *Goldstone-Mode*.



Freie Energie des XY-Modell bei $T > T_0$ bzw. $T < T_0$ („*mexican hat potential*“) und Fluktuationsmoden. Für $T < T_0$ kostet eine der Moden keine Energie im Grenzfall langer Wellenlänge.

Allgemeine Formulierung

Wir betrachten einen Phasenübergang mit einem Ordnungsparameter, der durch n reelle Koordinaten parametrisiert werden kann. In der geordneten Phase ist die Symmetrie spontan gebrochen. Die Symmetriegruppe der ungeordneten Phase sei G_0 , die der geordneten Phase $G \subset G_0$ (Untergruppe). Die Operationen aus G_0 , die nicht in G enthalten sind, führen eine der entarteten Gleichgewichtszustände der geordneten Phase in einen anderen über.

Sei g_0 die *Dimension* von G_0 und $g \leq g_0$ diejenige von G . (Die Dimension ist die Anzahl reeller Zahlen, die mindestens erforderlich sind, um alle Gruppenelemente zu parametrisieren. Betrachte dabei die Symmetrieeoperationen für *beliebige*, auch inhomogene Ordnungsparameter. Diskrete – z.B. endliche – Gruppen haben Dimension Null.) Dann bedarf es $\tilde{g} := g_0 - g \geq 0$ reeller Zahlen, um die entarteten Gleichgewichtszustände in der geordneten Phase zu parametrisieren.

Fluktuationsmoden für <i>homogene</i> (kollineare) Gleichgewichtszustände						
System	Ordnungsp.	n	g_0	g	\tilde{g}	$n - \tilde{g}$
ϕ^4 -Modell (Ising-Modell)	ϕ	1	0	0	0	1
Ferroelektrikum, Op. p_z^0	p_z^0	1	0	0	0	1
Ferroelektrikum, Op. (p_x^0, p_y^0)	(p_x^0, p_y^0)	2	0	0	0	2
XY-Modell	(m_1, m_2)	2	1	0	1	1
BCS-Supraleiter	$\Delta_1 + i\Delta_2$	2	1	0	1	1
<i>planar rotator model</i>	$e^{i\varphi}$	1	1	0	1	0
Heisenberg-Modell	(m_1, m_2, m_3)	3	3	1	2	1
O(n)-Vektor-Modell	(ϕ_1, \dots, ϕ_n)	n	$\frac{n(n-1)}{2}$	$\frac{(n-1)(n-2)}{2}$	$n - 1$	1

Für alle T existieren n Fluktuationsmoden $\delta\phi_i$, da der Ordnungsparameter in n unabhängigen Richtungen variiert werden kann. Entwickle die Energie um den Gleichgewichtszustand, siehe 4.3.1:

$$\beta E[\phi(\mathbf{x})] \cong \beta F_0[\bar{\phi}(\mathbf{x})] + \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \sum_{ij} \mathcal{G}_{0;ij}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta\phi_i(\mathbf{x}) \delta\phi_j(\mathbf{x}') \quad (4.85)$$

(die Koeffizienten sind die inversen Molekularfeld-Korrelationsfunktionen). Diagonalisiere den Gauß-Beitrag \rightarrow Eigenmoden, *Fluktuationsmoden* $\delta\phi'_i$:

$$\begin{aligned} \beta E[\phi(\mathbf{x})] &\cong \beta F_0 + \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \sum_i \mathcal{G}_{0;i}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta\phi'_i(\mathbf{x}) \delta\phi'_i(\mathbf{x}') \\ &= \beta F_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_i \mathcal{G}_{0;i}^{-1}(\mathbf{q}) |\delta\phi'_i(\mathbf{q})|^2. \end{aligned} \quad (4.86)$$

Wir verallgemeinern die Ergebnisse aus 4.2.4 (Heisenberg-Modell):

(a) Für $T > T_0$: n Moden mit endlichem $\mathcal{G}_{0;i}^{-1}$ für $q \rightarrow 0$ – selbst sehr langwellige Fluktuationen kosten Energie. Man spricht von *massiven* Moden.

(b) Für $T < T_0$: \tilde{g} Moden mit *verschwindendem* $\mathcal{G}_{0;i}^{-1}$ für $q \rightarrow 0$ und $n - \tilde{g}$ Moden mit endlichem $\mathcal{G}_{0;i}^{-1}$. Im Grenzfall unendlich langer Wellenlänge kosten Fluktuationen, die einen Gleichgewichtszustand in einen anderen überführen, keine Energie. Wir hatten in 4.2.4 gesehen, dass die Korrelationsfunktion für diese Moden für alle $T < T_0$ *algebraisch* statt exponentiell abfällt. Diese \tilde{g} Moden

heißen *Goldstone-Moden* (eigtl. nur bei $q = 0$), sie treten immer bei gebrochener kontinuierlicher Symmetrie auf. Dies ist der Inhalt des *Goldstone-Theorems*.

4.4.2 Typen von Ordnung

Wir betrachten die Korrelationsfunktion des *Ordnungsparameters* ϕ selbst:

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') := \langle \phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}') \rangle = \mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle \langle \phi(\mathbf{x}') \rangle. \quad (4.87)$$

Konkret für das $O(n)$ -Vektor-Modell:

$$\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle \phi_i(\mathbf{x})\phi_j(\mathbf{x}') \rangle. \quad (4.88)$$

Die folgenden Ergebnisse lassen sich leicht auf beliebige Systeme verallgemeinern.

(a) Für $T > T_0$ (Übergangstemperatur in der Landau-Theorie) ist $\mathcal{D}_{ij} = \mathcal{G}_{ij}$. Wir haben n massive Moden $\delta\phi_i$ und die Energie ist

$$E = \int d^d x \left(\frac{\alpha}{2} \delta\phi_i \delta\phi_i + \frac{\gamma}{2} \nabla\delta\phi_i \cdot \nabla\delta\phi_i \right) \quad (4.89)$$

mit impliziter Summation über i . Nach Fourier-Transformation wird daraus

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} (\alpha + \gamma q^2) \delta\phi_i^*(\mathbf{q})\delta\phi_i(\mathbf{q}) \quad (4.90)$$

und damit

$$\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{1}{Z} \int \underbrace{\left(\prod_{\mathbf{q}, i} d^2\delta\phi_i(\mathbf{q}) \right)}_{D^2\delta\phi} \delta\phi_i^*(\mathbf{q})\delta\phi_j(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{1}{2k_B T} \sum_{\mathbf{q}} (\alpha + \gamma q^2) \delta\phi_i^*(\mathbf{q})\delta\phi_i(\mathbf{q}) \right). \quad (4.91)$$

(\prod' : Produkt über alle Eigenmoden – die $\phi_i(\mathbf{q})$ sind komplex mit $2nN$ reellen Komponenten, aber nur nN sind verschieden, da $\phi_i(-\mathbf{q}) = \phi_i^*(\mathbf{q})$. Wird über alle $2nN$ integriert, zählt man alle Moden doppelt und muß die Wurzel aus Z ziehen.) Die Schreibweise $D^2\delta\phi$ (oder $D\delta\phi D\delta\phi^*$) ist nur eine Abkürzung. Im Kontinuums-Grenzfall *definiert* der volle Ausdruck ein *Funktionalintegral*. Es folgt:

$$\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{\alpha + \gamma q^2} \delta_{ij}, \quad (4.92)$$

unser Ergebnis aus 4.2.4, etwas allgemeiner.

Im Ortsraum: für alle d und große \mathbf{x} fällt $\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{x})$ exponentiell auf einer Skala ξ ab \rightarrow *kurzreichweitige Ordnung*

(b) Für $T < T_0$ ist eine Behandlung für allgemeine n und d schwierig. Betrachte zunächst $n = 2$ (XY -Modell). Wir betrachten $\phi(\mathbf{x})$ selbst:

$$E = \int d^d x \left(\frac{\alpha}{2} \phi_i\phi_i + \frac{\beta}{4} (\phi_i\phi_i)^2 + \frac{\gamma}{2} \nabla\phi_i \cdot \nabla\phi_i \right). \quad (4.93)$$

Drücke ϕ_i durch Polarkoordinaten aus: $\phi_1 = (\bar{\phi} + \eta) \cos \psi$, $\phi_2 = (\bar{\phi} + \eta) \sin \psi$, wobei $\bar{\phi}$ der Mittelwert von ϕ aus der Landau-Theorie ist. Die Energie ist in Gauß'scher Ordnung

$$\begin{aligned} E &\cong E_0(\bar{\phi}) + \int d^d x \left(\frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} 6\bar{\phi}^2 \eta^2 + \frac{\gamma}{2} \nabla\eta \cdot \nabla\eta \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma}{2} \bar{\phi}^2 (\nabla \cos \psi \cdot \nabla \cos \psi + \nabla \sin \psi \cdot \nabla \sin \psi) \right. \\ &\quad \left. + \gamma \bar{\phi} (\cos \psi \nabla\eta \cdot \nabla \cos \psi + \sin \psi \nabla\eta \cdot \nabla \sin \psi) \right) \\ &= E_0 + \int d^d x \left(\frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} 6\bar{\phi}^2 \eta^2 + \frac{\gamma}{2} \nabla\eta \cdot \nabla\eta + \frac{\gamma}{2} \bar{\phi}^2 \nabla\psi \cdot \nabla\psi \right) \\ &= E_0 + \int d^d x \left(-\alpha \eta^2 + \frac{\gamma}{2} \nabla\eta \cdot \nabla\eta + \frac{\gamma}{2} \bar{\phi}^2 \nabla\psi \cdot \nabla\psi \right) \end{aligned} \quad (4.94)$$

E_0 ist das Landau-Resultat. Terme erster Ordnung fallen weg, Mischterme in $\eta\psi$ ebenso (zweiter Schritt). Die Korrelationsfunktion ist

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{1}{Z} \int D^2\eta D^2\psi [\bar{\phi} + \eta(\mathbf{x})] [\bar{\phi} + \eta(\mathbf{x}')] \left\{ \begin{array}{c} \cos \psi(\mathbf{x}) \\ \sin \psi(\mathbf{x}) \end{array} \right\}_i \left\{ \begin{array}{c} \cos \psi(\mathbf{x}') \\ \sin \psi(\mathbf{x}') \end{array} \right\}_j e^{-E/k_B T} \\
&= \frac{Z_0}{Z} \int D^2\eta [\bar{\phi} + \eta(\mathbf{x})] [\bar{\phi} + \eta(\mathbf{x}')] e^{-E_\eta/k_B T} \\
&\quad \times \int D^2\psi \left\{ \begin{array}{c} \cos \psi(\mathbf{x}) \\ \sin \psi(\mathbf{x}) \end{array} \right\}_i \left\{ \begin{array}{c} \cos \psi(\mathbf{x}') \\ \sin \psi(\mathbf{x}') \end{array} \right\}_j e^{-E_\psi/k_B T} \\
&\equiv \mathcal{D}_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathcal{D}_\psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta_{ij}
\end{aligned} \tag{4.95}$$

- $\mathcal{D}_{ij} = 0$ für $i \neq j$ da $\sin \psi \cos \psi$ ungerade, aber E_ψ gerade
- $\mathcal{D}_{11} = \mathcal{D}_{22}$ aus Symmetriegründen

\mathcal{D}_η ist einfach

$$\mathcal{D}_\eta(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \bar{\phi}^2 + \frac{1}{Z_\eta} \int D^2\eta \eta(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}') e^{-E_\eta/k_B T}. \tag{4.96}$$

$\mathcal{D}_\eta \rightarrow \bar{\phi}^2 = \text{const}$ für $|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \rightarrow \infty$.

Wir betrachten nun den Winkelanteil. Die Fourier-transformierte Energie ist

$$E = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left[(-2\alpha + \gamma q^2) \eta^*(\mathbf{q}) \eta(\mathbf{q}) + \gamma \bar{\phi}^2 q^2 \psi^*(\mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}) \right] \equiv E_0 + E_\eta + E_\psi. \tag{4.97}$$

ψ ist also eine Goldstone-Mode, wie zu erwarten war.

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_\psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{1}{Z_\psi} \int D^2\psi \cos \psi(\mathbf{x}) \cos \psi(\mathbf{x}') e^{-E_\psi/k_B T} \\
&= \frac{2}{Z_\psi} \int D^2\psi e^{-i\psi(\mathbf{x})} e^{i\psi(\mathbf{x}')} e^{-E_\psi/k_B T} = \frac{2}{Z_\psi} \int D^2\psi e^{-i\psi(\mathbf{x}) + i\psi(\mathbf{x}') - E_\psi/k_B T} \\
&= \frac{2}{Z_\psi} \int D^2\psi \exp \left(\sum_{\mathbf{q}} \left[-\frac{i}{\sqrt{V}} \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} + \frac{i}{\sqrt{V}} \psi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1}{2k_B T} \gamma \bar{\phi}^2 q^2 \psi^*(\mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}) \right] \right).
\end{aligned} \tag{4.98}$$

Nun faktorisiert das Integral, wobei wir berücksichtigen, dass zu jedem \mathbf{q} nur ein reeller Winkel-Freiheitsgrad gehört. Wir können auch über *komplexe* $\psi(\mathbf{q})$ für *die Hälfte* der \mathbf{q} integrieren:

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}_\psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{2}{Z_\psi} \prod'_{\substack{\mathbf{q} \\ q_1 \geq 0}} \int d^2\psi(\mathbf{q}) \exp \left(+ \frac{i}{\sqrt{V}} [e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}] \psi(\mathbf{q}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{i}{\sqrt{V}} [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} - e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}] \psi^*(\mathbf{q}) - \frac{1}{k_B T} \gamma \bar{\phi}^2 q^2 \psi^*(\mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}) \right) \\
&= 2 \prod'_{\mathbf{q}} \exp \left(-\frac{k_B T}{V \gamma \bar{\phi}^2 q^2} [e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}] [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} - e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}] \right) \\
&= 2 \exp \left(-\frac{2k_B T}{V \gamma \bar{\phi}^2} \sum'_{\mathbf{q}} \frac{1 - \cos \mathbf{q} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})}{q^2} \right) \\
&= 2 \exp \left(-\frac{2k_B T}{(2\pi)^d \gamma \bar{\phi}^2} \int' d^d q \frac{1 - \cos \mathbf{q} \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x})}{q^2} \right).
\end{aligned} \tag{4.99}$$

- Für $d = 1$:

$$\int_0^\infty dq \frac{1 - \cos q(x' - x)}{q^2} = \frac{\pi}{2} (x' - x) \tag{4.100}$$

$$\Rightarrow \mathcal{D}_\psi(x, x') = 2 \exp \left(-\frac{k_B T}{2\gamma \bar{\phi}^2} (x' - x) \right). \tag{4.101}$$

$\Rightarrow \mathcal{D}$ fällt für $0 < T < T_0$ *exponentiell* ab \rightarrow *kurzreichweitige Ordnung*

- Für $d = 2$:

$$\int_0^\infty dq \int_0^\pi d\varphi \frac{1 - \cos(q|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \cos \varphi)}{q} = \pi \int_0^\infty dq \frac{1 - J_0(q|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)}{q}. \quad (4.102)$$

Das Integral divergiert \rightarrow Abschneideparameter Λ :

$$\begin{aligned} \dots &= \pi \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\Lambda dq \frac{q}{q^2 + \epsilon^2} [1 - J_0(q|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)] \\ &= \pi \ln(\Lambda|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|) \end{aligned} \quad (4.103)$$

$$\Rightarrow \mathcal{D}_\psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sim |\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^{-k_B T / 2\pi\gamma\bar{\phi}^2}. \quad (4.104)$$

$\Rightarrow \mathcal{D}$ fällt für $0 < T < T_0$ *algebraisch* ab \rightarrow *quasi-langreichweitige Ordnung*

Daher: $\langle \phi_i \rangle = 0 \Rightarrow \mathcal{G}_{ij} = \mathcal{D}_{ij}$ und

$$\mathcal{G}_{ij}(\mathbf{x}) \sim \delta_{ij} |\mathbf{x}|^{-k_B T / 2\pi\gamma\bar{\phi}^2} \equiv \delta_{ij} |\mathbf{x}|^{-\eta} \quad (4.105)$$

$$\Rightarrow \eta = k_B T / 2\pi\gamma\bar{\phi}^2. \quad (4.106)$$

\rightarrow kritisches Verhalten für alle $0 < T < T_0$, Exponent η hängt von T ab!

- Für $d = 3$:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dq \int_0^\pi d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta [1 - \cos(q|\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \cos \varphi)] &= 2\pi \int_0^\infty dq [1 - J_0(q|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|)] \\ &\cong 2\pi \left(\Lambda - \frac{1}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|} \right) \end{aligned} \quad (4.107)$$

$$\Rightarrow \mathcal{D}_\psi(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sim \exp\left(\frac{2k_B T}{(2\pi)^2 \gamma \bar{\phi}^2} \frac{1}{|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|}\right) \rightarrow 1 \quad \text{für } |\mathbf{x}' - \mathbf{x}| \rightarrow \infty. \quad (4.108)$$

$\Rightarrow \mathcal{D}$ bleibt endlich \rightarrow *langreichweitige Ordnung*

Allgemein: Ordnung im $O(n)$ -Modell in d Dimensionen für $0 < T < T_0$ aufgrund *Gauß'scher* Fluktuationen (für $T = 0$ immer LRO, für $T > T_0$ immer SRO):

$n \setminus d$	1	2	3	$d \geq 4$
1	LRO*	LRO	LRO	LRO
2	SRO	QLRO*	LRO	LRO
3	SRO	SRO	LRO	LRO
$n \geq 4$	SRO	SRO	LRO	LRO

*: wesentliche Effekte nicht-Gauß'scher Fluktuationen.

- exponentieller Abfall \rightarrow kurzreichweitige Ordnung, *short-range order (SRO)*
- algebraischer Abfall \rightarrow quasi-langreichweitige Ordnung, *quasi-long-range order (QLRO)*
- endlicher Grenzwert \rightarrow langreichweitige Ordnung, *long-range order (LRO)*

Bei SRO und QLRO wird $\langle \phi_i \rangle = 0$ für alle $T > 0 \rightarrow$ Übergangstemperatur bzgl. *des Ordnungsparameters* ϕ_i wird auf $T_c = 0$ geschoben. In 7.5 werden wir sehen, dass für $n = d = 2$ dennoch ein Phasenübergang bei $T > 0$ auftreten kann.

4.4.3 Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorem

Verallgemeinerung der Ergebnisse des letzten Abschnitts (ohne Beweis):

Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorem: Gegeben sei ein System mit kontinuierlicher Symmetrie bezüglich eines beliebigen Feldes (Ordnungsparameters) aber ohne langreichweitige Wechselwirkungen. Dann existiert im Gleichgewicht in $d = 2$ Dimensionen für $T > 0$ keine langreichweitige Ordnung dieses Feldes.

In 4.4.2 haben wir dieses Theorem für das XY-Modell bewiesen. Man sagt auch: *in 2D kann eine kontinuierliche Symmetrie nicht spontan gebrochen werden.* Wichtig:

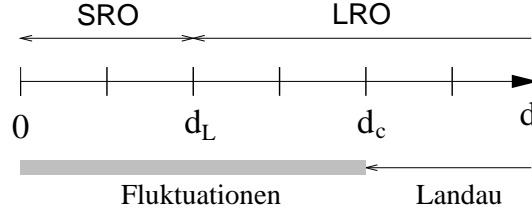
- bei langreichweitiger Wechselwirkung (z.B. Coulomb-Wechselwirkung),
- außerhalb des Gleichgewichts (z.B. in einem stationären Zustand eines offenen Systems) oder
- bei $T = 0$

kann LRO auftreten.

Untere kritische Dimension

Anders ausgedrückt: für die $O(n)$ -Modelle mit $n \geq 2$ existiert kein endlicher Erwartungswert des Feldes für $T > 0$ und $d \leq 2 \rightarrow d_L = 2$ ist die *untere kritische Dimension* dieser Modelle.

Allgemein: für $d < d_L$ zerstören Fluktuationen die langreichweitige Ordnung. Für $d > d_L$ bleibt die Ordnung erhalten. $d = d_L$ muss i.A. gesondert betrachtet werden.



„Phasendiagramm“ der $O(n)$ -Modelle ($n \geq 2$) als Funktion der Dimension d .

4.5 Kritische Fluktuationen

4.5.1 Allgemeines

Bisher haben wir die Energie bis zur zweiten Ordnung in Fluktuationen entwickelt. Dies ist eine gute Näherung, wenn Fluktuationen *klein* sind. Wir hatten gesehen, dass das innerhalb eines durch das Ginzburg-Kriterium beschriebenen Bereichs nicht zutrifft. Hier muß man Fluktuationen über die Gauß'schen hinaus mitnehmen. Diese nennt man *kritische Fluktuationen*.

Es gibt eine Reihe von Methoden zur Behandlung kritischer Fluktuationen:

(a) Exakte Berechnung. Problem: Funktioniert nur bei einer kleinen Gruppe von Modellen, v.a. bei vielen eindimensionalen und einigen zweidimensionalen, siehe 6.

(b) Taylor-Entwicklung der Energie in höherer Ordnung \rightarrow *Wechselwirkung zwischen Fluktuationen* \rightarrow feldtheoretische Behandlung oder (äquivalent) Green-Funktions-Methoden. Die einfachste Methode dieser Art ist die *Näherung des selbstkonsistenten Feldes*, siehe den nächsten Abschnitt.

Problem: in der Entwicklung sind *topologische Defekte* nicht enthalten, siehe Kap. 5.

(c) Renormierungsgruppen-Theorie, umgeht die Entwicklung der Energie in Fluktuationen \rightarrow kann topologische Defekte berücksichtigen (muss dies aber nicht), siehe 7.

4.5.2 Näherung des selbstkonsistenten Feldes (RPA)

Eine einfache Methode, kritische Fluktuationen näherungsweise zu berücksichtigen, ist die *Näherung des selbstkonsistenten Feldes* (*self-consistent-field approximation*). Je nach Kontext heißt sie auch *random phase approximation* (RPA) oder *Hartree-Näherung*. Prinzip:

- Ersetze in der Energie in Termen der Ordnung $n > 2$ Produkte der Art ϕ^2 durch ihren Erwartungswert $\langle \phi^2 \rangle$.
- Berechne $\langle \phi^2 \rangle$ aus der sich ergebenden Energie (*Selbstkonsistenz*).

Beispiel: ϕ^4 -Modell mit der Energie

$$E = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{4} \phi^4(\mathbf{x}) + \frac{\gamma}{2} \nabla \phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi(\mathbf{x}) \right] \quad (4.109)$$

mit $\alpha = a(T - T_0)$. Näherung für den ϕ^4 -Term: es gibt 6 Möglichkeiten, zwei Faktoren ϕ aus ϕ^4 zu wählen, daher

$$\phi^4 \cong 6 \langle \phi^2 \rangle \phi^2. \quad (4.110)$$

Bemerkung: Für n -komponentige Ordnungsparameter lautet der kombinatorische Faktor $2(n + 2)$.

Die Fluktuations-Korrelationsfunktion ist (*exakt* für die genäherte Energie)

$$k_B T \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q}) = \alpha + 3\beta \langle \phi^2 \rangle + \gamma q^2. \quad (4.111)$$

Für T größer als die (unbekannte) Übergangstemperatur T_c ist

$$\begin{aligned} \langle \phi^2 \rangle &= \mathcal{D}(0, 0) \equiv \mathcal{G}(0, 0) \\ &= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{k_B T}{\alpha + 3\beta \langle \phi^2 \rangle + \gamma q^2}, \end{aligned} \quad (4.112)$$

wir erhalten eine Selbstkonsistenz-Gleichung für $\langle \phi^2 \rangle$. Mit $\chi^{-1} = k_B T \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{q} = 0)$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \chi^{-1} &= \alpha + 3\beta k_B T \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{\chi^{-1} + \gamma q^2} \\ &= \alpha + 3\beta k_B T \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int_0^\Lambda dq q^{d-1} (\chi^{-1} + \gamma q^2)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.113)$$

Die tatsächliche Übergangstemperatur T_c ist *definiert* durch $\chi(T_c) = \infty$, also

$$0 = a(T_c - T_0) + \frac{3\beta}{\gamma} k_B T_c \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int_0^\Lambda dq q^{d-3} = a(T_c - T_0) + \frac{3\beta}{\gamma} k_B T_c \frac{\Omega_d \Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d (d-2)}. \quad (4.114)$$

Es folgt

$$T_c = \left(1 + \frac{3\beta k_B \Omega_d \Lambda^{d-2}}{a\gamma (2\pi)^d (d-2)} \right)^{-1} T_0. \quad (4.115)$$

- $T_c < T_0$: kritische Fluktuationen verkleinern T_c
- $T_c \rightarrow 0$ für $d \rightarrow 2$: untere kritische Dimension $d_L = 2$

Wir untersuchen nun noch das Verhalten von χ nahe T_c .

$$\chi^{-1}(T) = \chi^{-1}(T) - \chi^{-1}(T_c) = a(T - T_c) + 3\beta k_B \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int_0^\Lambda dq q^{d-1} \left(\frac{T}{\chi^{-1} + \gamma q^2} - \frac{T_c}{\gamma q^2} \right). \quad (4.116)$$

Dies lässt sich umschreiben als

$$\chi^{-1} = \tilde{a}(T - T_c) - \frac{3\beta}{\gamma} k_B T_c \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \chi^{-1} \underbrace{\int_0^\Lambda dq \frac{q^{d-3}}{\chi^{-1} + \gamma q^2}}_{I_d(\chi^{-1})}. \quad (4.117)$$

Für $d > d_c = 4$ ist das Integral I_d konvergent und wird zu $I_d(0) = \Lambda^{d-4}/\gamma(d-4)$ für $T \rightarrow T_c$. Dann ist

$$\chi(T) = \frac{1 + 3\beta/\gamma k_B T_c \times \text{const}}{\tilde{a}(T - T_c)} \sim (T - T_c)^{-1}, \quad (4.118)$$

der kritische Exponent ist $\gamma = 1$, wie in der Landau-Theorie.

Für $d < d_c = 4$ divergiert $I_d(\chi^{-1})$ für $T \rightarrow T_c$ ($\chi^{-1} \rightarrow 0$):

$$I_d(\chi^{-1}) = \gamma^{(2-d)/2} \chi^{(4-d)/2} \int_0^{\Lambda\sqrt{\gamma\chi}} dy \frac{y^{d-3}}{1+y^2} \rightarrow \gamma^{(2-d)/2} \chi^{(4-d)/2} B_d \quad \text{für } \chi \rightarrow \infty \quad (4.119)$$

(B_d ist eine d -abhängige Konstante). Dann ist in

$$\chi^{-1} = \tilde{a}(T - T_c) - \frac{3\beta}{\gamma} k_B T_c \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \chi^{-1} I_d(\chi^{-1}) \quad (4.120)$$

die linke Seite für $T \approx T_c$ vernachlässigbar und daher

$$\tilde{a}(T - T_c) = 3\beta k_B T_c \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} B_d \gamma^{-d/2} \chi^{(2-d)/2} \quad (4.121)$$

$$\Rightarrow \chi(T) \sim (T - T_c)^{-\gamma} \quad \text{mit } \gamma = \frac{2}{d-2}. \quad (4.122)$$

- $\gamma \rightarrow 1$ für $d \rightarrow d_c = 4$: stetiger Übergang zum Landau-Verhalten
- $\gamma > 1$ für $d_L < d < d_c$: kritische Fluktuationen führen zu einer *stärkeren* Divergenz

Man kann zeigen, dass die Gültigkeit der Vernachlässigung der linken Seite durch das Ginzburg-Kriterium bestimmt ist. Außerhalb des *kritischen Bereichs* ist andererseits I_d vernachlässigbar und $\chi(T) \propto (T - T_c)^{-1}$ (Landau-Verhalten).

Wir betrachten zum Schluß die Korrelationslänge. In der RPA wird nur $\alpha \rightarrow \alpha + 3\beta\langle\phi^2\rangle$ ersetzt, aber der Gradienten-Term bleibt unverändert. Daher

$$\mathcal{G}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{\chi^{-1} + \gamma q^2} \equiv \frac{k_B T \chi}{1 + q^2 \xi^2} \quad (4.123)$$

mit

$$\xi = \sqrt{\gamma \chi} \sim (T - T_c)^{-\gamma/2} \quad (4.124)$$

für $T > T_c$. Allgemein ist $\xi \sim (T - T_c)^{-\nu}$ und daher

$$\nu = \frac{\gamma}{2} = \frac{1}{d-2} \quad (4.125)$$

für $d < d_c = 4$. Wieder wird die Divergenz durch kritische Fluktuationen stärker.

Kapitel 5

Topologische Defekte

5.1 Gebrochene kontinuierliche Symmetrie

Selbst wenn man die Energie eines Systems bis zu beliebiger Ordnung in den Fluktuationen entwickelt, hat man i.A. Beiträge vernachlässigt. Diese stammen von *topologischen Defekten*. (Sie sind nicht in der Entwicklung der Energie enthalten, da sie sich nicht in ebene Wellen entwickeln lassen.) Solche Defekte sind z.B. entscheidend für den Phasenübergang des zweidimensionalen XY -Modells. Topologische Defekte treten nicht nur als Fluktuationen, sondern auch in (inhomogenen) Grundzuständen bei entsprechenden Randbedingungen auf.

Wir beginnen mit der Diskussion von Defekten bei gebrochener *kontinuierlicher* Symmetrie.

5.1.1 Vortizes

Gegeben sei ein d -dimensionales XY -Modell mit dem Ordnungsparameter

$$\mathbf{m}(\mathbf{x}) = (\cos \theta, \sin \theta) m \quad (5.1)$$

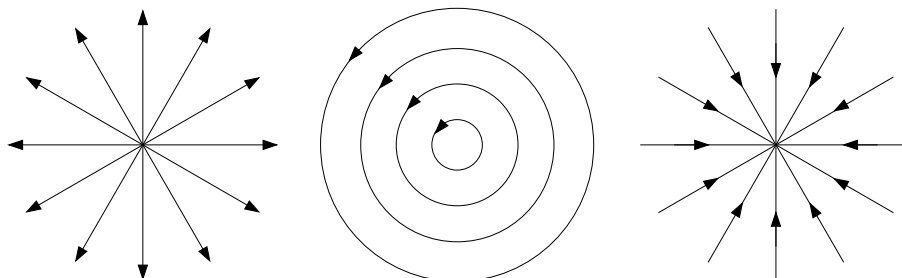
und der Energie

$$E = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{4} (\mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{x}))^2 + \frac{\gamma}{2} \nabla_\nu m_i(\mathbf{x}) \nabla_\nu m_i(\mathbf{x}) \right]. \quad (5.2)$$

Wir betrachten spezielle Konfigurationen in $d = 2$ mit

$$\theta = \varphi + \theta_0, \quad (5.3)$$

wobei φ der Polarwinkel von \mathbf{x} und θ_0 eine konstante Zahl ist. Diese Konfiguration heißt *Vortex* und ist ein Spezialfall eines *topologischen Defektes*.



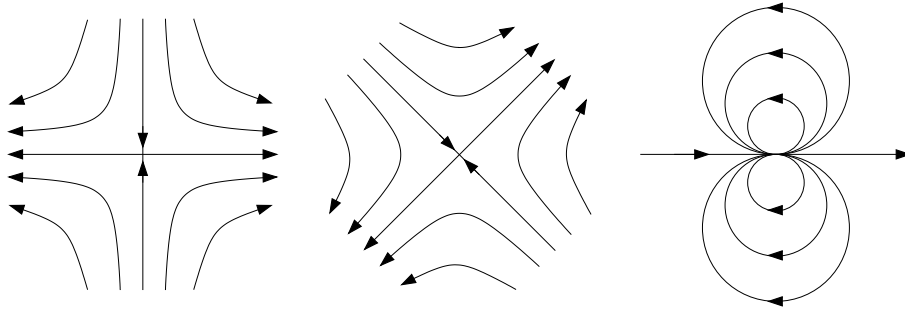
Drei Darstellungen eines Vortex, unterschieden durch $\theta_0 = 0$, $\theta_0 = \pi/2$ und $\theta_0 = \pi$.

Am Ursprung, $\mathbf{x} = 0$, ist φ nicht definiert \rightarrow *Singularität* in $\mathbf{m}(\mathbf{x})$. Kann vermieden werden, wenn $m(\mathbf{x}) \rightarrow 0$ für $\mathbf{x} \rightarrow 0$. Der Bereich, in dem m wesentlich unterdrückt ist, heißt *Vortexkern* (core). Unabhängig davon ist $\nabla\theta = 1/|\mathbf{x}| = 1/r$ immer unstetig bei $\mathbf{x} = 0$. Beachte, dass $\theta(\varphi)$ entweder stetig *oder* eindeutig gewählt werden kann, aber nicht beides zugleich. Wählt man θ eindeutig, z.B. im Intervall $[0, 2\pi[$, so ergeben sich Sprünge entlang von Linien im Ortsraum.

Verallgemeinerung:

$$\theta = k\varphi + \theta_0 \quad (5.4)$$

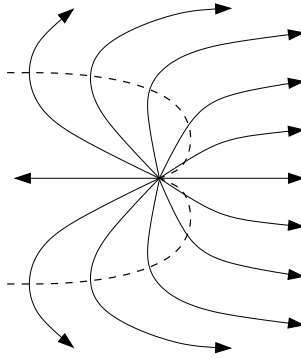
mit einer *ganzen* Zahl k (sonst wäre \mathbf{m} unstetig):



Vortizes mit $k = -1$, $\theta_0 = 0$ (links), $k = -1$, $\theta = \pi/2$ (Mitte) und $k = 2$, $\theta_0 = 0$ (rechts). Vortizes mit $k = -1$ nennt man auch *Antivortizes*.

Die ganze Zahl k heißt *Windungszahl* oder *Vortizität*, oder allgemeiner *topologische Invariante*. Der Wert θ_0 und die genauer Form $\theta = k\varphi + \theta_0$ ist nicht entscheidend, wichtig ist die Windungszahl. Grund: Konfigurationen mit derselben Windungszahl können durch *stetige Verformung* von $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ ineinander umgewandelt werden.

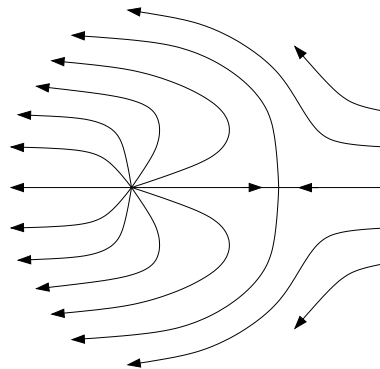
Andererseits kann ein Vortex ($k \neq 0$) *nicht* durch eine stetige Verformung zum Verschwinden gebracht werden, er ist *topologisch stabil*. Allgemein kann k nicht durch eine stetige Verformung geändert werden.



Versuch, \mathbf{m} überall entlang der x -Achse auszurichten: es entstehen Linien, entlang derer sich \mathbf{m} stark ändert (gestrichelt). Die Energie für diese Konfiguration geht mit γL , wobei L die lineare Systemgröße ist. (Die Zerstörung des Vortex durch Übergang in die ungeordnete Phase und zurück in einen homogenen geordneten Zustand kostet sogar Energie von der Ordnung $\alpha^2 \beta^{-1} L^2$.) Die Energie eines Vortex geht dagegen mit $\gamma \ln L$, siehe unten.

Also: im unendlichen System unendliche Energiebarriere! Das ist der *physikalische* Grund für die Stabilität von Vortizes. Der *mathematische* (topologische) Beweis ergibt sich aus der Homotopie-Theorie, siehe unten.

Ein System aus einem Vortex ($k = 1$) und einem Antivortex ($k = -1$) hat die gesamte Windungszahl Null und kann daher durch stetige Verformung in einen homogenen Zustand überführt werden: die Defekte können *annihilieren*. Umgekehrt können sie aus dem Grundzustand gebildet werden, z.B. durch *Fluktuationen*.



Vortex-Antivortex-Paar.

Wir bestimmen nun die Energie von Vortizes. Diese besteht aus

- einem Beitrag E_c vom reduzierten Ordnungsparameter im Kern,
- einem Beitrag E_{el} vom Gradiententerm (elastische Energie) außerhalb des Kerns.

E_c ist gegeben durch die verlorene *Kondensationsenergie* mit der Energiedichte e_{con} , also

$$E_c = Cr_c^2 e_{con}, \quad (5.5)$$

wobei r_c der Radius des Vortexkerns und C eine Konstante ist.

Die elastische Energie für die Konfiguration $\theta = k\varphi + \theta_0$ ist

$$\begin{aligned} E_{el} &= \int d^2x \frac{\gamma}{2} \nabla_\nu m_i \nabla_\nu m_i \cong \frac{\gamma}{2} \overline{m}^2 \int d^2x \nabla\theta \cdot \nabla\theta \\ &= \frac{1}{2} \underbrace{\gamma \overline{m}^2}_K k^2 \int d^2x \frac{\mathbf{e}_\varphi}{r} \cdot \frac{\mathbf{e}_\varphi}{r} = \pi \gamma \overline{m}^2 k^2 \int_{r_c}^R \frac{dr}{r} \\ &= \pi \gamma \overline{m}^2 k^2 \ln \frac{R}{r_c}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

wobei R der typische Radius des Systems ist. E_{el} divergiert also *logarithmisch* mit der Systemgröße, da ein Vortex das Feld $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ überall stört. Die Größe $\gamma \overline{m}^2 \equiv K$ heißt *Steifigkeit*, da sie die Energie beschreibt, die Verformungen des Winkels θ kostet.

Die Gesamtenergie

$$E_v = E_c + E_{el} = Cr_c^2 e_{con} + \pi \gamma \overline{m}^2 k^2 \ln \frac{R}{r_c} \quad (5.7)$$

hängt vom Kernradius r_c ab. Minimierung von E_v bezüglich r_c liefert

$$2Cr_c e_{con} - \frac{\pi \gamma \overline{m}^2 k^2}{r_c} = 0 \quad \Rightarrow \quad r_c^2 = \frac{\pi \gamma \overline{m}^2 k^2}{2C e_{con}}. \quad (5.8)$$

Nun ist $\overline{m}^2 = \alpha/\beta$ und die Kondensationsenergie ist $e_{con} = \alpha^2/4\beta$, daher

$$r_c^2 = \frac{2\pi\gamma k^2}{C\alpha} \sim k^2 \xi^2. \quad (5.9)$$

Also ist die Größe des Kerns proportional zur Korrelationslänge, was vernünftig ist, da \mathbf{m} sich auf der Längenskala ξ ändert. Der Kernradius ist auch proportional zur Windungszahl.

Die Energie zweier Vortizes mit Windungszahlen k_1, k_2 läßt sich analog berechnen. Eine explizite Realisation ist

$$\theta = k_1 \arctan \frac{y - y_1}{x - x_1} + k_2 \arctan \frac{y - y_2}{x - x_2} + \theta_0, \quad (5.10)$$

wobei $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ die Orte der Vortizes sind. Die Energie ist

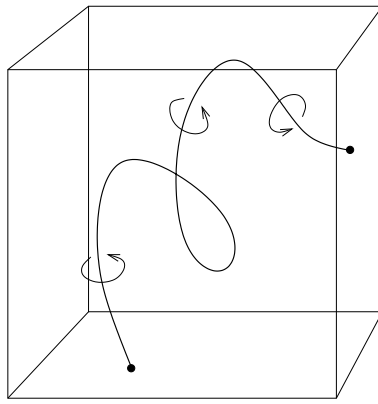
$$E_{k_1 k_2} = E_c(k_1) + E_c(k_2) + \pi \gamma \overline{m}^2 (k_1 + k_2)^2 \ln \frac{R}{r_c} - 2\pi \gamma \overline{m}^2 k_1 k_2 \ln \frac{r}{r_c}, \quad (5.11)$$

wobei $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ der Abstand ist. Speziell für ein Vortex-Antivortex-Paar ergibt sich

$$E_{+-} = 2E_c(k=1) + 2\pi \gamma \overline{m}^2 \ln \frac{r}{r_c}. \quad (5.12)$$

Diese Energie ist *endlich* für $R \rightarrow \infty$. Die Wechselwirkung ist *anziehend*.

In $d = 3$ existieren Vortizes in Form von *Vortexlinien* (denke die zweidimensionalen Zeichnungen jeweils in die dritte Dimension identisch fortgesetzt). Sie sind charakterisiert durch eine Windungszahl k , die aber nun von einer gewählten Richtung abhängt \rightarrow Rechte-Hand-Regel legt Vorzeichen von k fest.



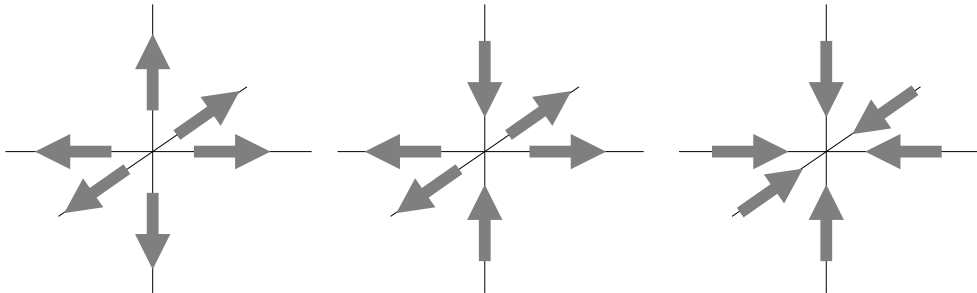
Vortexlinie.

Allgemeine Abhängigkeit der Existenz von Vortizes von d :

- $d = 1$: keine Vortizes möglich
- $d = 2$: Vortizes mit nulldimensionaler Singularität (Punktdefekt)
- $d = 3$: Vortizes mit eindimensionaler Singularität (Liniendefekt)
- allgemeines $d \geq 2$: Vortizes mit $(d - 2)$ -dimensionaler Singularität

5.1.2 Hedgehogs

Wir betrachten nun ein Heisenberg-Modell ($n = 3$). Für alle d ist ein Vortex nun nicht mehr topologisch stabil, da man \mathbf{m} an allen Raumpunkten kontinuierlich in die senkrechte Richtung drehen kann. In $d = 2$ existieren keine topologischen Defekte. In $d = 3$ dagegen existieren nulldimensionale sogenannte *hedgehogs* (Igel). Sie sind wie Vortizes durch eine Windungszahl k charakterisiert, die sich unter stetigen Verformungen nicht ändert.



Hedgehogs mit Windungszahl $k = 1$ (links) und $k = -1$ (Mitte und rechts). Die beiden Defekte mit $k = -1$ gehen durch eine Drehung um π um die z -Achse ineinander über.

5.1.3 Homotopie-Theorie

Die Beobachtung, dass es für $n = d = 2$ und $n = d = 3$ jeweils punktförmige topologische Defekte gibt, ist kein Zufall. Wir führen zunächst die *Kodimension* d' eines Defektes ein:

$$d' = d - d_s, \quad (5.13)$$

wobei d_s die Dimension des Defektes (d.h. der Singularität) ist. Zum Beispiel für Vortizes in zwei Dimensionen ist $d' = 2$. Man kann allgemein zeigen:

- Konfigurationen mit $n > d'$ sind stetig in einen homogenen Zustand überführbar, d.h. topologisch instabil
- Konfigurationen mit $n = d'$ können topologische Defekte sein
- Konfigurationen mit $n < d'$ sind für ein stetiges Feld unmöglich

Allgemein definiert das Feld $\phi(\mathbf{x})$ eine Abbildung vom Ortsraum in den Wertebereich $\{\phi\}$ von ϕ . Außerhalb des Kerns von Defekten liegt ϕ in einer Teilmenge M_ϕ von $\{\phi\}$, die die entarteten Minima

der freien Energie umfaßt (bei Brechung einer kontinuierlichen Symmetrie hat diese Teilmenge die Mächtigkeit ∞). M_ϕ heißt *Grundzustands-Mannigfaltigkeit*.

Betrachte nun einen Defekt mit der Kodimension $d' = d - d_s$. Im Ortsraum existieren d' -dimensionale Hyperflächen, die auf dem d_s -dimensionalen Defekt senkrecht stehen ($d' + d_s = d$). Wählt man auf einer solchen Hyperfläche alle Punkt mit festem Abstand r vom Defekt aus, so erhält man eine $d' - 1$ -dimensionale Hyperkugel $S_{d'-1}$ um den Defekt herum. Beispiele:

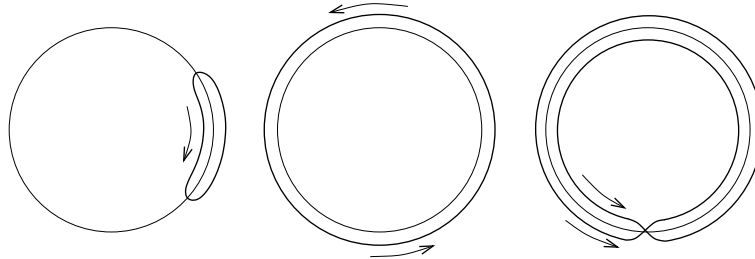
- Vortex in zwei Dimensionen: ein Kreis ($d' - 1 = 1$)
- Vortexlinie in drei Dimensionen: ein Kreis ($d' - 1 = 1$)
- Hedgehog in drei Dimensionen: eine Kugel ($d' - 1 = 2$)

ϕ definiert nun eine Abbildung von dieser Hyperkugel $S_{d'-1}$ in M_ϕ .

Definition: zwei Abbildungen $\phi, \phi' : S_d \rightarrow M_\phi$ gehören zu derselben *Homotopie-Klasse*, wenn ϕ durch eine stetige Transformation in ϕ' überführt werden kann.

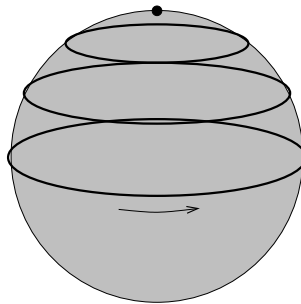
Die Homotopie-Klassen werden durch einen (*oder mehrere*) ganzzahlige Indizes unterschieden, die gerade die Windungszahlen sind.

Beispiel 1: beim zweidimensionalen XY-Modell sind $S_{d'-1} = M_\phi = S_1$, d.h. ein Einheitskreis. Beispiele für Abbildungen ϕ sind wieder $\varphi \mapsto k\varphi + \theta_0$. ϕ und ϕ' gehören zu derselben Homotopie-Klasse, wenn das Bild $\phi(S_1)$ bzw. $\phi'(S_1)$ den Kreis gleichoft überdeckt. Dies wird natürlich von der Windungszahl k bestimmt.



Bilder (dicke Kurve) eines Kreises S_1 auf $M_\phi \equiv S_1$ unter drei verschiedenen Abbildungen mit den Windungszahlen $k = 0$, $k = 1$ und $k = 2$.

Beispiel 2: beim zweidimensionalen Heisenberg-Modell ist $S_{d'-1} = S_1$, aber die Grundzustandsmannigfaltigkeit ist $M_\phi = S_2$, d.h. eine Einheitskugel. Nun lassen sich *alle* Abbildungen $S_1 \rightarrow S_2$ zu einem Punkt (entspricht homogenem Zustand) zusammenziehen, d.h. alle ϕ gehören nur zu einer Homotopie-Klasse; es existiert keine topologische Invariante.



Bilder (dicke Kurve) eines Kreises S_1 auf $M_\phi \equiv S_2$ unter verschiedenen Abbildungen. Man kann den „Äquator“, der einem Vortex entspricht, auf den „Nordpol“ zusammenziehen, der homogener Magnetisierung entspricht.

Die Homotopie-Theorie bestimmt auch die topologischen Invarianten für Kombinationen von Defekten, siehe Chaikin/Lubensky.

5.1.4 Meronen und Skyrmionen

Zum Abschluß wollen wir zwei weitere wichtige Defekte besprechen: *Meronen* und *Skyrmionen*. Wir betrachten einen Ferromagneten mit einer *leichten Ebene*, d.h. die Magnetisierung liegt bevorzugt

z.B. in der xy -Ebene im Ordnungsparameter-Raum. Die Energie lautet

$$E = \int d^2x \left[\frac{\alpha}{2} \mathbf{m} \cdot \mathbf{m} + \frac{\beta}{4} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{m})^2 - \frac{K_2}{2} m_z m_z + \dots \right] \quad \text{mit } K_2 < 0. \quad (5.14)$$

Dieses Modell hat explizit nur Rotationssymmetrie um die z -Achse, wie das XY -Modell. Ein Meron läßt sich wie folgt charakterisieren:

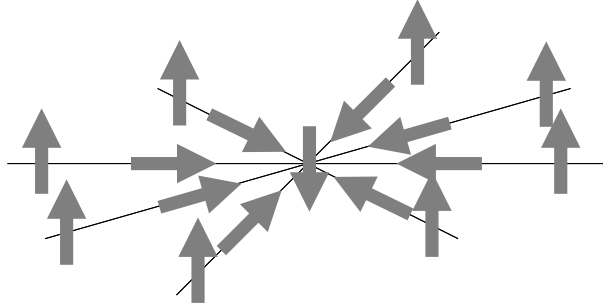
- außerhalb des Kerns bildet $\mathbf{m}(\mathbf{x})$ einen Vortex, m_z ist klein
- im Kern rotiert die Magnetisierung aus der xy -Ebene heraus und zeigt im Zentrum in die positive oder negative z -Richtung

Diese Konfiguration existiert, weil es typischerweise für die Magnetisierung günstiger ist, sich im Kern aus der Ebene herauszudrehen, anstatt \mathbf{m} auf Null zu reduzieren.

Aus Sicht der Homotopie-Theorie ist dieser Fall identisch mit dem zweidimensionalen XY -Modell, da die Grundzustands-Mannigfaltigkeit in beiden Fällen ein Kreis ist. Daher sind Meronen topologische Defekte mit der Kodimension $d' = 2$. Sie sind nur topologisch stabil durch das Vorliegen von Anisotropie, $K_2 < 0$.

Aus physikalischer Sicht würde es Energie $\sim |K_2|L^2$ kosten, den Ordnungsparameter überall in z -Richtung zu drehen. Ohne ihn in z -Richtung zu drehen kann man ihn ebensowenig abwickeln wie einen Vortex.

Skyrmionen treten in demselben Modell mit $K_2 > 0$ (leichte Achse) auf und im *isotropen* Ferromagneten im äußeren Magnetfeld. Wir betrachten den isotropen Fall mit einem *kleinen* Feld entlang der z -Achse. Dann wird zur Energie ein Zeeman-Term $-m_z H_z$ addiert, der die Symmetrie vollständig bricht. Das Tal in $E(\mathbf{m})$ bleibt jedoch erhalten, auch wenn die Entartung aufgehoben ist. Wir nennen die Menge aller \mathbf{m} in diesem Tal weiterhin M_ϕ . Ein Skyrmion ist in gewissem Sinne ein „doppeltes Meron“:



Skyrmion in zwei Dimensionen.

Um einzusehen, dass es topologisch stabil ist, betrachten wir \mathbf{m} als Abbildung des *gesamten* Ortsraums R^2 in $M_\phi = S_2$. In Anwesenheit eines Skyrmions überdeckt die Abbildung M_ϕ genau einmal. *Ohne* äußeres Feld könnte man das Bild des Randes des Ortsraums über die Kugel M_ϕ ziehen und \mathbf{m} überall entlang der negativen z -Richtung ausrichten. Ohne Feld läßt sich die Skyrmion-Lösung mit minimaler Energie explizit angeben:

$$\hat{m}_x = \frac{2x\lambda}{r^2 + \lambda^2}, \quad \hat{m}_y = \frac{2y\lambda}{r^2 + \lambda^2}, \quad \hat{m}_z = 1 - \frac{2\lambda^2}{r^2 + \lambda^2}, \quad (5.15)$$

$\hat{\mathbf{m}}$ ist der Einheitsvektor der Magnetisierung. λ ist eine *beliebige* Länge. Dies ist ein Beispiel für *Skaleninvarianz*. $\lambda \rightarrow \infty$ ($\mathbf{m} \rightarrow -m\hat{\mathbf{z}}$ für alle \mathbf{x}) entspricht der Abwicklung des Skyrmions.

Mit Feld funktioniert das nicht: weit weg vom Kern zwingt das äußere Feld \mathbf{m} in die positive z -Richtung, die Skaleninvarianz wird zerstört. (Physikalisch betrachtet würde es eine Energie $\sim H_z L$ kosten, die Magnetisierung am Rand zu drehen.) Daher haben alle Punkte mit $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ dieselbe Magnetisierung und können miteinander identifiziert werden $\rightarrow R_2$ geht in S_2 über. Dann ist $\mathbf{m} : S_2 \rightarrow S_2$ und das Skyrmion kann nicht abgewickelt werden.

Bemerkung: beim ganzzahligen Quanten-Hall-Effekt können Skyrmionen im *Grundzustand* auftreten \rightarrow nicht kollinearer Ferromagnet mit interessanten Eigenschaften.

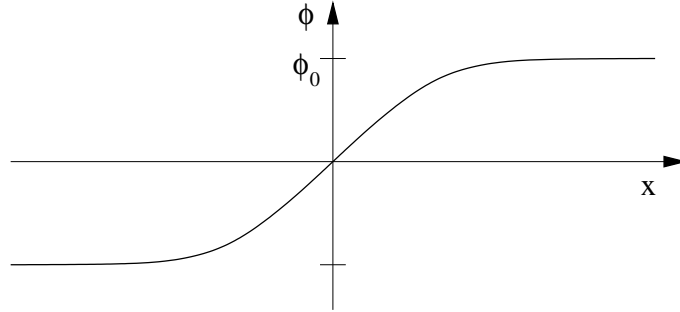
5.2 Gebrochene diskrete Symmetrie

5.2.1 Domänenwände

Nun kommen wir zum Fall gebrochener *diskreter* Symmetrie wie z.B. im ϕ^4 -Modell, das wir hier beispielhaft betrachten wollen. Die Energie ist

$$E = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} \phi^2 + \frac{\beta}{4} \phi^4 + \frac{\gamma}{2} \nabla \phi \cdot \nabla \phi \right]. \quad (5.16)$$

In der geordneten Phase hat das Modell zwei entartete Gleichgewichtszustände mit $\phi = \pm \phi_0 = \pm \sqrt{-\alpha/\beta}$. Betrachte die folgende Konfiguration in *einer Dimension*:



Für $x \rightarrow \infty$ und $x \rightarrow -\infty$ ist das System in jeweils verschiedenen Gleichgewichtszuständen. Dazwischen erfolgt ein kontinuierlicher Übergang. Diese Konfiguration heißt – je nach Kontext – *Domänenwand, Soliton oder Kink*.

- Die Domänenwand kann ohne Energieänderung verschoben werden...
- dabei bleibt aber jeweils „die Hälfte“ des Systems in einem der beiden Minima...
- es würde die divergente Energie $\sim \alpha^2 \beta L$ kosten, zu einem homogenen Zustand überzugehen.

Eine Domänenwand ist *topologisch stabil*. Man kann ihr eine *topologische Invariante*

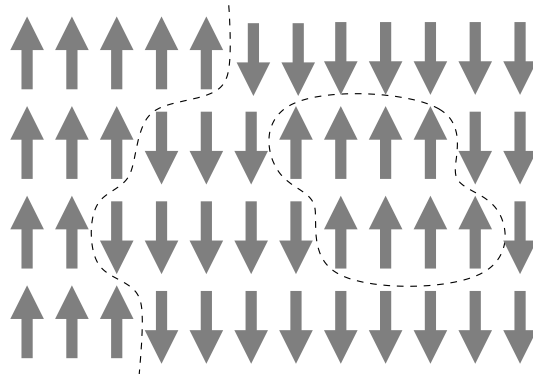
$$Q := \frac{\phi(\infty) - \phi(-\infty)}{2\phi_0} \quad (5.17)$$

zuordnen, diese ist

- $Q = +1$ für $\phi(-\infty) = -\phi_0$ und $\phi(\infty) = \phi_0$
- $Q = -1$ für $\phi(-\infty) = \phi_0$ und $\phi(\infty) = -\phi_0$
- $Q = 0$ für $\phi(-\infty) = \phi(\infty)$

Diese Invariante verhält sich wie erwartet: z.B. hat ein *Kink-Antikink-Paar* die Invariante Null und kann durch Annihilation der Defekte in einen homogenen Zustand überführt werden.

Verallgemeinerung:



Domänenwände im zweidimensionalen Ising-Modell.

- Allgemein haben Domänenwände in d -dimensionalen Räumen eine Dimension von $d - 1$, da sie Teilmengen mit $\phi \approx \phi_{0,n}$ trennen.

- Sie treten auf, falls ein Ordnungsparameter existiert, der im geordneten Zustand eine *abzählbare* (insbesondere endliche) Menge von entarteten Gleichgewichtszuständen aufweist.
- Sie können auch in Systemen mit kontinuierlicher Entartung auftreten und von *langreichweitigen Wechselwirkungen* stabilisiert werden. Beispiel: Heisenberg-Ferromagnet mit Dipol-Wechselwirkung.

5.2.2 Energie einer Domänenwand

Wir wollen die Energie einer Domänenwand im Rahmen der Landau-Theorie berechnen. Sie hat zwei Beiträge:

- ϕ weicht vom Gleichgewichtszustand ab („Kondensationsenergie“)
- ϕ ändert sich räumlich (Gradiententerm)

Betrachte eine ebene Wand in der ϕ^4 -Theorie in d Dimensionen. Ihre Energie ist

$$E = A \int dx \left[\frac{\alpha}{2} \phi^2(x) + \frac{\beta}{4} \phi^4(x) + \frac{\gamma}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \right] \equiv A \int dx e(x), \quad (5.18)$$

wobei A die $(d-1)$ -dimensionale Hyperfläche der Wand ist. Ihre *Oberflächenspannung* ist $\sigma = E/A$. Die Energie soll minimiert werden. Aus $\delta E / \delta \phi(x) = 0$ erhält man die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\alpha \phi + \beta \phi^3 - \gamma \frac{d^2}{dx^2} \phi = 0. \quad (5.19)$$

Diese hat für einen Kink (Antikink) die Lösungen

$$\phi(x) = \pm \phi_0 \tanh \frac{x - x_0}{2\xi} \quad \text{mit} \quad \xi = \sqrt{\frac{\gamma}{-2\alpha}}. \quad (5.20)$$

(Beweis:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \phi}{dx^2} &= \pm \frac{\phi_0}{2\xi} \frac{d}{dx} \cosh^{-2} \frac{x - x_0}{2\xi} = \pm \frac{-2\phi_0}{4\xi^2} \cosh^{-3} \frac{x - x_0}{2\xi} \sinh \frac{x - x_0}{2\xi} \\ &= \pm \frac{-(-\alpha)^{3/2}}{\beta^{1/2} \gamma} \cosh^{-2} \frac{x - x_0}{2\xi} \tanh \frac{x - x_0}{2\xi} \end{aligned} \quad (5.21)$$

und

$$\phi^3 = \pm \phi_0^3 \tanh^3 \frac{x - x_0}{2\xi} = \pm \frac{(-\alpha)^{3/2}}{\beta^{3/2}} \left(1 - \cosh^{-2} \frac{x - x_0}{2\xi} \right) \tanh \frac{x - x_0}{2\xi}, \quad (5.22)$$

woraus folgt

$$\alpha \phi + \beta \phi^3 - \gamma \frac{d^2}{dx^2} \phi = \pm \frac{(-\alpha)^{3/2}}{\beta^{1/2}} \left[-1 + \left(1 - \cosh^{-2} \frac{x - x_0}{2\xi} \right) + \cosh^{-2} \frac{x - x_0}{2\xi} \right] \tanh \frac{x - x_0}{2\xi} = 0, \quad (5.23)$$

q.e.d.) Die Energiedichte ist dann

$$e(x) = 2 \underbrace{\left| -\frac{\alpha^2}{4\beta} \right|}_{e_0} \cosh^{-4} \frac{x - x_0}{2\xi} \quad (5.24)$$

und die Oberflächenspannung

$$\sigma = \int dx e(x) = \frac{16}{3} \xi |e_0|. \quad (5.25)$$

- Die Abweichung von $|\phi(x)|$ im Vergleich zu ϕ_0 und die Energie der Wand sind auf einen Bereich des Durchmessers $\sim \xi$ beschränkt \rightarrow die *Dicke* der Domänenwand ist $\sim \xi$.
- Die Energie hängt nicht von x_0 , der Mitte der Wand, ab.
- Die Oberflächenspannung ist $\sim \xi$ (Dicke) und $\sim |e_0|$.

Kapitel 6

Exakt lösbar Modelle

Bei der überwiegenden Zahl von Modellen der statistischen Physik kennt man die exakte Lösung, d.h. insbesondere die *exakte Zustandssumme*, nicht. Aus der Zustandssumme erhält man ja alle thermodynamischen Größen. Es gibt aber einige Modelle, die sich tatsächlich exakt behandeln lassen. Solche Systeme sind sehr wichtig

- als *guide line* für das kritische Verhalten allgemeinerer Systeme,
- als Ausgangspunkt für perturbative Methoden,
- zur Überprüfung der Skalenhypothese, siehe 7.1,
- als Testfeld für Theorien.

Zwar ist nur ein kleiner Teil aller relevanten Modelle exakt lösbar, aber dies sind dennoch mehr, als man vielleicht erwarten würde. In diesem Kapitel besprechen wir einige dieser Modelle, wobei wir einige wichtige Methoden einführen.

6.1 Eindimensionales Ising-Modell im äußeren Feld

6.1.1 Transfermatrix-Methode

Wir betrachten ein eindimensionales Ising-Modell auf einer linearen Kette mit N Plätzen und periodischen Randbedingungen (am Ende lassen wir $N \rightarrow \infty$ gehen). Das Modell wird definiert durch die Hamilton-Funktion

$$H = -J \sum_i s_i s_{i+1} - \tilde{h} \sum_i s_i, \quad (6.1)$$

wobei die Spins nur die Werte $s_i = \pm 1$ annehmen können. Der reduzierte Hamiltonian läßt sich auch als Summe über Bindungen schreiben:

$$-\frac{H}{k_B T} = \tilde{J} \sum_i s_i s_{i+1} + \frac{\tilde{h}}{2} \sum_i (s_i + s_{i+1}) = \sum_i K(s_i, s_{i+1}) \quad \text{mit} \quad (6.2)$$

$$K(s_i, s_{i+1}) = \tilde{J} s_i s_{i+1} + \frac{\tilde{h}}{2} (s_i + s_{i+1}), \quad (6.3)$$

wobei $\tilde{J} := J/k_B T$ etc. Die Zustandssumme ist

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} e^{-H/k_B T} = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \exp\left(\sum_i K(s_i, s_{i+1})\right) \\ &= \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} e^{K(s_1, s_2)} e^{K(s_2, s_3)} \dots e^{K(s_{N-1}, s_N)} e^{K(s_N, s_1)}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Die Funktion $e^{K(s, s')}$ läßt sich durch Matrixelemente einer 2×2 -Matrix \mathbf{M} ausdrücken:

$$e^{K(s, s')} = M_{ss'} \quad \text{mit } \mathbf{M} = \begin{pmatrix} e^{\tilde{J} + \tilde{h}} & e^{-\tilde{J}} \\ e^{-\tilde{J}} & e^{\tilde{J} - \tilde{h}} \end{pmatrix}, \quad (6.5)$$

wobei $s, s' = +1, -1$. M heißt *Transfermatrix*. Mit ihr läßt sich Z als Spur über ein Matrizenprodukt schreiben:

$$Z = \text{Tr } M^N. \quad (6.6)$$

Nun ändert sich die Spur einer Matrix unter Ähnlichkeitstransformationen nicht, insbesondere auch nicht bei Diagonalisierung. D.h. $\text{Tr } M^N$ ist einfach die Summe der beiden Eigenwerte von M^N . Für eine Diagonalmatrix ist jedoch die N -te Potenz trivial: die Eigenwerte von M^N sind die N -ten Potenzen der Eigenwerte m_+ und m_- von M :

$$Z = \text{Tr } M^N = m_+^N + m_-^N. \quad (6.7)$$

Die Eigenwerte von M lassen sich leicht berechnen:

$$m_{\pm} = e^{\tilde{J}} \cosh \tilde{h} \pm \sqrt{e^{2\tilde{J}} \sinh^2 \tilde{h} + e^{-2\tilde{J}}}. \quad (6.8)$$

Da $m_+ > m_- > 0$, ist im thermodynamischen Limes

$$m_+^N \gg m_-^N \quad \Rightarrow \quad Z \cong m_+^N \quad (6.9)$$

und die reduzierte Gibbs'sche freie Energie pro Teilchen ist

$$\frac{g}{k_B T} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{-\ln Z}{N} = -\ln m_+ = -\ln \left(e^{\tilde{J}} \cosh \tilde{h} + \sqrt{e^{2\tilde{J}} \sinh^2 \tilde{h} + e^{-2\tilde{J}}} \right). \quad (6.10)$$

Damit ist das Problem im wesentlichen gelöst. Die *Transfermatrix-Methode* läßt sich auch bei komplizierteren Problemen anwenden. Immer ist die Idee, die Zustandssumme als Spur einer – evtl. sehr großen – Transfermatrix zur Potenz N (Systemgröße) auszudrücken und zu beachten, dass im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ nur der größte Eigenwert der Transfermatrix von Bedeutung ist.

6.1.2 Kritisches Verhalten

Wir wollen das Ergebnis physikalisch interpretieren. Für kleine Temperaturen T und Magnetfelder h ist

$$g \cong -J - k_B T e^{-2J/k_B T} - \frac{h^2}{2k_B T} e^{2J/k_B T}. \quad (6.11)$$

Daraus folgt für die Magnetisierung

$$m = \langle s_i \rangle \cong -\frac{\partial g}{\partial h} = \frac{h}{k_B T} e^{2J/k_B T}, \quad (6.12)$$

also $m \rightarrow 0$ für $h \rightarrow 0$ bei $T > 0$: keine spontane Magnetisierung bei verschwindendem äußerem Feld. (Dies ist kein Spezialfall des Hohenberg-Mermin-Wagner-Theorems, da die gebrochene Symmetrie diskret ist). Die Suszeptibilität

$$\chi_T = -\frac{\partial^2 g}{\partial h^2} \cong \frac{1}{T} e^{2J/k_B T} \quad (6.13)$$

divergiert *exponentiell* für $T \rightarrow 0 \rightarrow$ kritischer Punkt bei $T = 0$ mit Exponent $\gamma = \infty$. Bei hohen Temperaturen $T \gg J$ ist dagegen

$$g \cong -k_B T \ln 2 - \frac{h^2}{2k_B T} \quad (6.14)$$

$$\Rightarrow \quad \chi_T \cong \frac{1}{T}, \quad (6.15)$$

d.h. wir erhalten das Curie-Gesetz mit dem Landau-Exponenten $\gamma = 1$. Die Abweichung von $\gamma = 1$ nahe am kritischen Punkt ($T = 0$) beruht nach Definition (der Landau-Theorie, die eben keine Fluktuationen enthält) auf Fluktuationen, die hier eine sehr große Korrektur bewirken.

Die spezifische Wärme für $h = 0$ und kleine T behandelt man ähnlich:

$$C_h = -T \frac{\partial^2 g}{\partial T^2} = \frac{4J^2}{k_B T^2} e^{-2J/k_B T}. \quad (6.16)$$

Sie *konvergiert* exponentiell (schneller als jedes Potenzgesetz) gegen Null $\rightarrow \alpha = -\infty$. $C_h \rightarrow 0$ für $T \rightarrow 0$ ergibt sich schon aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik!

Wir können auch die Korrelationsfunktion exakt berechnen. Sie ist hier definiert als

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(n) &:= \langle s_i s_{i+n} \rangle = \langle s_1 s_{1+n} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{s_1, \dots, s_N} s_1 s_{n+1} e^{-H/k_B T} \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{s_1, \dots, s_N} s_1 e^{K(s_1, s_2)} \dots e^{K(s_n, s_{n+1})} s_{n+1} e^{K(s_{n+1}, s_{n+2})} \dots e^{K(s_N, s_1)} \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{s_1, \dots, s_N} s_1 M_{s_1, s_2} \dots M_{s_n, s_{n+1}} s_{n+1} M_{s_{n+1}, s_{n+2}} \dots M_{s_N, s_1} \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{s_1, s_{n+1}} s_1 (M^n)_{s_1, s_{n+1}} s_{n+1} (M^{N-n})_{s_{n+1}, s_1}. \tag{6.17}
\end{aligned}$$

Speziell für $h = 0$ ist

$$M_{s, s'} = e^{\tilde{J} s s'} = \cosh \tilde{J} + s s' \sinh \tilde{J} = \cosh \tilde{J} (1 + s s' \tanh \tilde{J}), \tag{6.18}$$

wovon man sich leicht überzeugt, da nur vier verschiedene Kombinationen (s, s') auftreten. Es folgt

$$(M^n)_{s, s'} = 2^{n-1} \cosh^n \tilde{J} (1 + s s' \tanh^n \tilde{J}). \tag{6.19}$$

(Beweis durch Iteration: ist wahr für $n = 1$ und außerdem

$$\begin{aligned}
(M^n)_{s, s'} &= (M^{n-1} M)_{s, s'} = \sum_{\sigma=\pm 1} 2^{n-2} \cosh^{n-1} \tilde{J} (1 + \sigma \sigma \tanh^{n-1} \tilde{J}) \cosh \tilde{J} (1 + \sigma \sigma' \tanh \tilde{J}) \\
&= 2^{n-2} \sum_{\sigma=\pm 1} \cosh \tilde{J} (1 + \sigma \sigma' \tanh \tilde{J} + \sigma \sigma \tanh^{n-1} \tilde{J} + s \underbrace{\sigma \sigma}_{=1} s' \tanh^n \tilde{J}) \\
&= 2^{n-1} \cosh \tilde{J} (1 + s s' \tanh^n \tilde{J}), \tag{6.20}
\end{aligned}$$

q.e.d.) Damit ist

$$\begin{aligned}
\mathcal{D}(n) &= \frac{1}{Z} 2^{N-2} \cosh^N \tilde{J} \sum_{s_1, s_{n+1}} s_1 (1 + s_1 s_{n+1} \tanh^n \tilde{J}) s_{n+1} (1 + s_{n+1} s_1 \tanh^{N-n} \tilde{J}) \\
&= \frac{1}{Z} 2^N \cosh^N \tilde{J} (\tanh^n \tilde{J} + \tanh^{N-n} \tilde{J}). \tag{6.21}
\end{aligned}$$

Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ ist die Zustandssumme

$$Z = m_+^N = (2 \cosh \tilde{J})^N \tag{6.22}$$

und

$$\mathcal{D}(n) = \tanh^n \tilde{J} \equiv e^{-n/\xi}, \tag{6.23}$$

wo wir die (dimensionslose) Korrelationslänge

$$\xi = -\frac{1}{\ln \tanh \tilde{J}} \tag{6.24}$$

eingeführt haben. Für kleine Temperaturen ist $\xi \cong e^{2J/k_B T}/2$ und divergiert exponentiell $\rightarrow \nu = \infty$.

Die Exponenten, die die Temperaturabhängigkeit kritischer Größen beschreiben, sind offensichtlich anomal. Wir können jedoch noch etwas aussagen, wenn wir die Skalierung mit ξ anstatt $t \sim T$ betrachten: Wir hatten gesehen, dass die Suszeptibilität für kleine T die Form

$$\chi_T = \frac{1}{T} e^{2J/k_B T} = \exp\left(\frac{2J}{k_B T} + \ln T\right) \cong e^{2J/k_B T} = 2\xi \tag{6.25}$$

hat. Da nach Definition $\chi_T \sim \xi^{\gamma/\nu}$ können wir schreiben $\gamma/\nu = 1$. Ähnlich folgt

$$C_H \cong \xi^{-1} \quad \Rightarrow \quad \alpha/\nu = -1. \tag{6.26}$$

Das Skalenverhalten als Funktion der Korrelationslänge ist also durchaus normal und die entsprechenden Exponenten γ/ν etc. enthalten zusätzliche Informationen.

6.2 Zweidimensionales Ising-Modell

6.2.1 Lösung mittels Graphen

Es ist bisher nicht gelungen, die exakte Lösung für das zweidimensionale Ising-Modell im äußeren Feld zu finden. Wir fassen hier die Lösung für das Modell ohne äußeres Feld zusammen, die ursprünglich auf Lars Onsager zurückgeht. Onsagers Beweis ist sehr aufwendig und wir folgen hier dem einfacheren Lösungsweg aus Landau und Lifshitz Bd. 5 und Stanley.

Allgemeine Bemerkung: eindimensionale Modelle mit Wechselwirkung nur nächster Nachbarn und ohne äußeres Feld sind oft einfach exakt zu lösen. Wieso ist das in zwei Dimensionen anders? Für $d = 1$ ohne lokale Terme im Hamiltonian kann man oft auf neue Variablen transformieren, die den Bindungen entsprechen. Diese sind unabhängig, da es für N Plätze auch N Bindungen gibt. Auf einem zweidimensionalen Gitter gibt es dagegen immer mehr Bindungen als Gitterplätze und die neuen Variablen sind nicht unabhängig.

Die Hamilton-Funktion des Ising-Modells lautet

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j, \quad (6.27)$$

wobei sich die Summe über nächste Nachbarn auf einem Quadratgitter erstreckt und jede Bindung nur einmal zählt. Es ist wieder $s_i = \pm 1$. Das Gitter habe N Gitterplätze und wir nehmen wieder periodische Randbedingungen an. Wir wollen die Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp\left(\tilde{J} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j\right) \quad (6.28)$$

berechnen. Es ist

$$\exp(\tilde{J} s_i s_j) = \cosh \tilde{J} (1 + s_i s_j \tanh \tilde{J}) \quad (6.29)$$

(s.o.) und daher

$$Z = (\cosh \tilde{J})^{2N} Z' = (1 - \tanh^2 \tilde{J})^{-N} \equiv (1 - x^2)^{-N} Z' \quad (6.30)$$

mit $x := \tanh \tilde{J}$ und

$$Z' = \sum_{\{s_i\}} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + x s_i s_j). \quad (6.31)$$

Wenn man Z' ausmultipliziert, erhält man ein Polynom in x und den s_i . Die Terme in Z' sind offenbar von den Ordnungen 0 bis $2N$ in x . Da jeder Gitterpunkt in vier Bindungen vorkommt, enthält Z' für ein s_i Terme von der Ordnung 0 bis 4. Bei der Summation über die s_i verschwinden jedoch alle Terme, die mindestens ein s_i zu einer ungeraden Potenz enthalten (da $s_i = \pm 1$). Daher tritt jedes s_i nur in der Ordnung 0, 2 oder 4 auf. Nun ist $s_i^0 = s_i^2 = s_i^4 = 1 \rightarrow$ die s_i fallen ganz heraus, die Summe über alle s_i ergibt einfach einen Faktor $\sum_{\{s_i\}} 1 = 2^N$, die Anzahl der Konfigurationen.

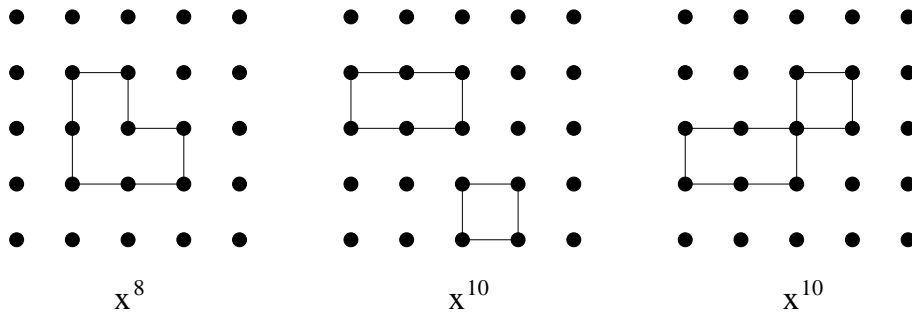
Z' kann nun als Polynom nur von x geschrieben werden:

$$Z' = 2^N \sum_{n=0}^{2N} g_n x^n, \quad (6.32)$$

wobei die Koeffizienten g_n noch bestimmt werden müssen, die angeben, wie oft der Term x^n bei der Ausmultiplikation erscheint. Die Terme in Z'

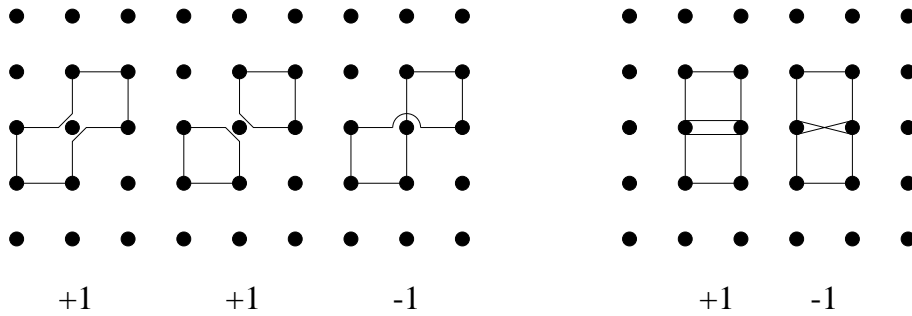
- enthalten s_i nur in der Form von Produkten $s_i s_j$ für nächste Nachbarn,
- jede solche Bindung kommt höchstens einmal vor,
- enthalten jedes s_i zu einer geraden Potenz (0,2,4),
- enthalten ein x für jede Bindung $s_i s_j$.

Daher läßt sich jeder Term als ein *geschlossener, ungerichteter Graph* auf dem Gitter darstellen.



Drei mögliche Graphen. Die Graphen können unzusammenhängend sein (Mitte) oder Selbstüberschneidungen haben (rechts). g_n ist nun die Anzahl der erlaubten Graphen mit n Kanten (Länge des Graphen). Das resultierende geometrische Problem wird in zwei Schritten gelöst.

(a) Zunächst drücken wir g_n durch die Anzahl aller erlaubten *zusammenhängenden* Graphen aus. Dazu zerlegen wir jeden Graphen in seine zusammenhängenden Teilgraphen. Das ist bei Graphen mit Selbstüberschneidungen nicht eindeutig. Betrachte z.B.:



Links: die drei möglichen Zerlegungen eines Graphen mit einer Selbstüberschneidung. Rechts: die beiden Zerlegungen eines anderen Graphen. Der Symmetriefaktor $(-1)^s$ ist ebenfalls angegeben.

Dies kann man berücksichtigen, indem man *alle* möglichen Zerlegungen mitzählt, aber sie mit einem Faktor $(-1)^s$ versieht, wobei s die Zahl der Selbstüberschneidungen ist. Die drei Graphen im linken Teil der Abbildung ergeben dann $+1$ Beiträge und die beiden rechts ergeben 0 Beiträge. Das ist richtig, da Bindungen in Z' nicht doppelt vorkommen. Man kann zeigen, dass dieses Verfahren für beliebige Graphen funktioniert.

Nun kann man zeigen, dass man für einen zusammenhängenden Graphen einen Faktor $-(-1)^s$ erhält, wenn man für jeden Gitterpunkt des Graphen einen Faktor $e^{i\phi/2}$ einführt, wobei ϕ der Drehwinkel des Graphen an diesem Punkt ist ($\phi = 0, \pm\pi/2$). Schließlich schreiben wir Z' als Summe über Graphen aus l Teilgraphen:

$$Z' = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l \frac{1}{l!} \sum_{n_1, \dots, n_l} f_{n_1} \cdots f_{n_l} x^{n_1 + \dots + n_l}. \quad (6.33)$$

- l ist die Anzahl der zusammenhängenden Teilgraphen
- $(-1)^l$ kompensiert die zusätzlichen Faktoren -1 in $-(-1)^s$
- $1/l!$ berücksichtigt, dass Vertauschung von Teilgraphen keine neuen Graphen ergibt
- n_1, \dots, n_l sind die Längen der Graphen
- f_n ist die Anzahl möglicher *zusammenhängender* Graphen der Länge n

Weiter sind die Summen über n_i unabhängig und daher

$$Z' = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l \frac{1}{l!} \left(\sum_n f_n x^n \right)^l = \exp \left(- \sum_n f_n x^n \right). \quad (6.34)$$

Dies ist ein Beispiel für eine *linked-cluster* Entwicklung. Die Summe steht nun im Exponenten und enthält dafür nur noch zusammenhängende Graphen („Cluster“).

(b) Wir müssen die Anzahl der zusammenhängenden Graphen der Länge n noch berechnen. Dieses komplizierte, rein geometrische Problem besprechen wir hier nicht, siehe Landau und Lifshitz.

Das Resultat ist:

$$Z' = \prod_{p_1, p_2=0}^L \sqrt{(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2) \left(\cos \frac{2\pi p_1}{L} + \cos \frac{2\pi p_2}{L} \right)}, \quad (6.35)$$

wobei $L := \sqrt{N}$ die lineare Abmessung des Systems ist. Demnach ist

$$Z = \frac{2^N}{(1-x^2)^N} \prod_{p_1, p_2=0}^L \sqrt{(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2) \left(\cos \frac{2\pi p_1}{L} + \cos \frac{2\pi p_2}{L} \right)}. \quad (6.36)$$

Das reduzierte Gibbs-Potential pro Spin ist dann

$$\frac{g}{k_B T} = \ln(1-x^2) - \frac{1}{2N} \sum_{p_1, p_2=0}^L \ln \left[(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2) \left(\cos \frac{2\pi p_1}{L} + \cos \frac{2\pi p_2}{L} \right) \right], \quad (6.37)$$

wobei wir eine irrelevante additive Konstante vernachlässigt haben. Im thermodynamischen Limes können wir von der Summe zum Integral übergehen. Mit der Substitution $\omega_i := 2\pi p_i/L$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{g}{k_B T} &= \ln(1-x^2) - \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\omega_1 \int_0^{2\pi} d\omega_2 \ln [(1+x^2)^2 - 2x(1-x^2)(\cos \omega_1 + \cos \omega_2)] \\ &= -2 \ln \cosh \frac{J}{k_B T} - \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\omega_1 \int_0^{2\pi} d\omega_2 \ln \left[\left(1 + \tanh \frac{J}{k_B T} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - 2 \tanh \frac{J}{k_B T} \left(1 - \tanh \frac{J}{k_B T} \right) (\cos \omega_1 + \cos \omega_2) \right]. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Dies ist eine Form der gesuchten Lösung. Beachte: wir können g nicht analytisch angeben, haben es aber auf ein zweidimensionales Integral zurückgeführt. Allgemein sieht man ein Problem als gelöst an, wenn es auf eine von N unabhängige Anzahl von Integration zurückgeführt ist.

6.2.2 Kritisches Verhalten

Wir interpretieren das Ergebnis. Das Argument des Logarithmus unter dem Integral in g wird minimal für $\cos \omega_1 = \cos \omega_2 = 1$ ($\omega_1 = \omega_2 = 0$), wo es den Wert $(1+x^2)^2 - 4x(1-x^2) = (x^2 + 2x - 1)^2$ annimmt. Also ist das Argument *nicht negativ*. Singuläres Verhalten erwarten wir nur, falls das Argument irgendwo im (*endlichen*) Integrationsbereich Null wird. Dies ist nur der Fall bei

$$x = x_c := \sqrt{2} - 1 \quad (6.39)$$

$$\Rightarrow k_B T_c = \frac{J}{\operatorname{artanh}(\sqrt{2} - 1)} = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.27 J. \quad (6.40)$$

Hier erwarten wir kritisches Verhalten.

Das Gibbs-Potential läßt sich für kleine $t = (T - T_c)/T_c$ entwickeln, indem man im Logarithmus nach ω_1, ω_2 und t entwickelt. Das Integral wird

$$\int d\omega_1 d\omega_2 \ln [c_1 t^2 + c_2 (\omega_1^2 + \omega_2^2)]. \quad (6.41)$$

Ausführen des Integrals ergibt die Form

$$g \cong a - \frac{b}{2} t^2 \ln |t|, \quad (6.42)$$

wobei a, b Konstanten sind und $b > 0$. Die Gibbs'sche freie Energie selbst ist am kritischen Punkt stetig, aber die spezifische Wärme

$$C_H \cong b \ln |t| \quad (6.43)$$

divergiert *logarithmisch*, d.h. der kritische Exponent ist $\alpha = \alpha' = 0$, siehe 1.3.1. Der Koeffizient b ist für $t > 0$ und $t < 0$ gleich, im Unterschied zur Landau-Theorie.

Die übrigen kritischen Exponenten lassen sich ebenfalls bestimmen. Die Rechnungen sind recht kompliziert. Für die Magnetisierung findet man

$$\langle s_i \rangle \sim |t|^{1/8} \quad \text{also } \beta = \frac{1}{8} \quad (6.44)$$

nahe bei T_c . Die sehr schwache Divergenz der spezifischen Wärme und der sehr steile Anstieg der Magnetisierung zeigen, dass der Phasenübergang *beinahe erster Ordnung* ist. Weiter findet man $\delta = 15$. Nimmt man die Skalenhypothese an, so folgen alle übrigen Exponenten, siehe 7.1.

Zusammenfassung der Exponenten für das 1D und 2D Ising-Modell (*: logarithmisch):

	α	α'	β	γ	γ'	δ	η	ν	ν'
1D Ising-Modell	$-\infty$	-	-	∞	-	-	1	∞	-
2D Ising-Modell	0*	0*	1/8	7/4	7/4	15	1/4	1	1
Landau-Theorie	0	0	1/2	1	1	3	0	1/2	1/2

6.2.3 Dualitätstransformation und exaktes T_c

Es gibt eine viel einfachere, elegante Methode, T_c für das zweidimensionale Ising-Modell zu berechnen. Sie benutzt die Methode der *Dualitätstransformation*.

Der Hamiltonian H enthält einen Beitrag $-J < 0$ für alle Bindungen mit $s_i = s_j$ sowie einen Beitrag $+J > 0$ für $s_i \neq s_j$. Er läßt sich auch schreiben als

$$H = -2NJ + 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \begin{cases} 0 & \text{für } s_i = s_j \\ 1 & \text{für } s_i \neq s_j \end{cases} \equiv -2NJ + 2JN_u. \quad (6.45)$$

$2N$ ist die Anzahl der Bindungen zwischen nächsten Nachbarn und N_u ist die Anzahl der Bindungen zwischen zwei *unterschiedlichen* Spins. Die Zustandssumme ist also

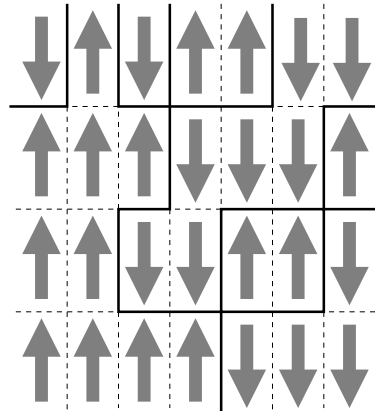
$$Z = e^{2N\tilde{J}} \sum_{\{s_i\}} e^{-2\tilde{J}N_u}. \quad (6.46)$$

Dieser Ausdruck läßt sich mit Hilfe des *dualen Gitters* interpretieren. Man erhält das duale Gitter, indem man jedem elementaren (d.h. kleinstmöglichen) Polygon des ursprünglichen Gitters einen Gitterpunkt des dualen Gitters zuordnet, der sich im Mittelpunkt des Polygons befindet. Die Kanten des dualen Gitters schneiden dann die Kanten des ursprünglichen Gitters in ihrer Mitte unter einem rechten Winkel. Die Dualitätsrelation ist *reflexiv*.

Speziell ist das duale Gitter des Quadratgitters mit der Gitterkonstante a ebenfalls ein Quadratgitter mit der Gitterkonstante $a \rightarrow$ das Quadratgitter ist *selbstdual*.

Nun zeichnen wir das duale Gitter in folgender Weise:

- Kanten des dualen Gitters zwischen zwei gleichen s_i, s_j werden gestrichelt gezeichnet und
- Kanten des dualen Gitters zwischen zwei verschiedenen s_i, s_j werden dick gezeichnet.



Dann ist N_u offenbar die Gesamtlänge des Graphen, der von den dicken Kanten gebildet wird. Es sind offenbar nur geschlossene Graphen erlaubt, da sie gewissermaßen Domänenwände bilden. Graphen müssen nicht zusammenhängen. Also handelt es sich um *dieselbe* Klasse von Graphen auf

dem dualen Gitter, die wir oben auf dem originalen Gitter betrachtet hatten. Sei G^* ein Graph der Länge $|G^*|$ auf dem dualen Gitter. Dann ist die Zustandssumme des *dualen Ising-Modells*, d.h. auf dem dualen Gitter,

$$Z^* = e^{2N\tilde{J}} \sum_{G^*} e^{-2\tilde{J}|G^*|}. \quad (6.47)$$

Definieren wir \tilde{J}^* über

$$e^{-2\tilde{J}} =: \tanh \tilde{J}^*, \quad (6.48)$$

so folgt

$$Z^* = (\tanh \tilde{J}^*)^{-N} \sum_{G^*} (\tanh \tilde{J}^*)^{|G^*|}. \quad (6.49)$$

Dies hat schon eine ähnliche Form wie die Zustandssumme auf dem ursprünglichen Gitter, nämlich, wie wir oben gesehen haben,

$$Z = (\cosh \tilde{J})^{2N} 2^N \sum_G (\tanh \tilde{J})^{|G|} \quad (6.50)$$

(G : Graph auf dem originalen Gitter).

Z wird bei einem bestimmten $\tilde{J} = \tilde{J}_c$ singular. Diese Singularität beruht auf der Summe, da die Vorfaktoren glatte Funktionen sind. Z^* wird bei dem dazugehörigen \tilde{J}^* ebenfalls singular, da die beiden Formen der Zustandssumme identisch sind. Wir nehmen nun an, dass das Modell nur einen einzigen Phasenübergang zeigt (müßte noch gezeigt werden!). Dann wird die Summe nur bei *einem* Wert von \tilde{J} bzw. \tilde{J}^* singular. Daher gilt am kritischen Punkt

$$\tilde{J} = \tilde{J}^* = \tilde{J}_c \quad (6.51)$$

oder auch

$$e^{-2\tilde{J}_c} = \tanh \tilde{J}_c = \frac{e^{\tilde{J}_c} - e^{-\tilde{J}_c}}{e^{\tilde{J}_c} + e^{-\tilde{J}_c}} \quad (6.52)$$

$$\Rightarrow e^{\tilde{J}_c} = \sqrt{1 + \sqrt{2}} \quad (6.53)$$

und schließlich

$$\tilde{J}_c \equiv \frac{J}{k_B T_c} = \frac{\ln(1 + \sqrt{2})}{2} \quad \text{oder} \quad k_B T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (6.54)$$

Dies ist natürlich dasselbe Ergebnis wie oben.

Weiter sehen wir:

- Z ist eine Entwicklung in $x \equiv \tanh(J/k_B T) \sim 1/T$ für große $T \rightarrow$ *Hochtemperaturentwicklung*
- Z^* ist eine Entwicklung in $e^{-2J/k_B T} \rightarrow 0$ für kleine $T \rightarrow$ *Tieftemperaturentwicklung*

Außerdem: \tilde{J}^* wächst, wenn \tilde{J} kleiner wird; man kann zeigen, dass $\sinh 2\tilde{J} \sinh 2\tilde{J}^* = 1$. Die Dualitätstransformation bildet das Ising-Modell bei tiefen Temperaturen (großes \tilde{J}) auf das *duale* Ising-Modell bei hohen Temperaturen (kleines \tilde{J}^*) ab. Hieraus folgt sofort, dass der Phasenübergang symmetrisch ist: $\alpha = \alpha'$ etc. Allgemein:

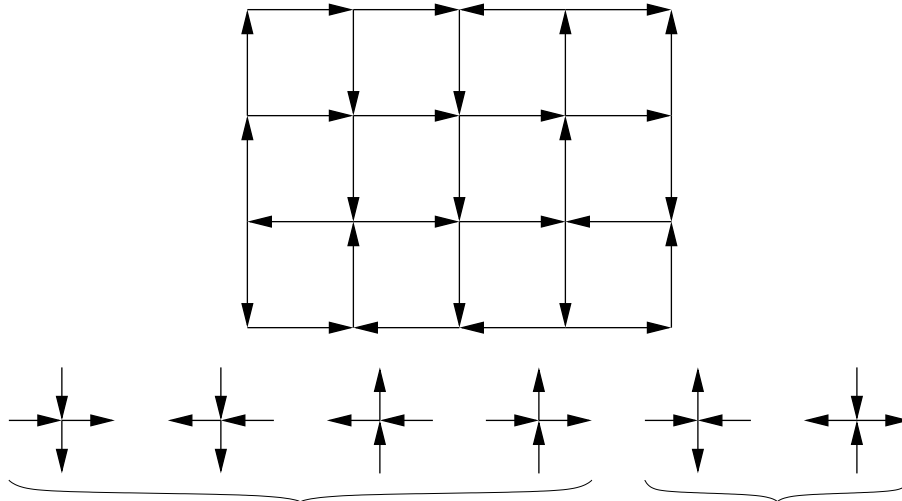
Dualitätstransformationen bilden ein System bei tiefen Temperaturen auf das duale System bei hohen Temperaturen ab und umgekehrt.

Im Allgemeinen ist das duale Modell *nicht* mit dem ursprünglichen (mit anderen Parametern) identisch. Nur diese spezielle Eigenschaft des Ising-Modells auf dem Quadratgitter, die *Selbstdualität*, hat es uns erlaubt, T_c exakt zu bestimmen. Für andere Systeme eröffnen Dualitätstransformationen die Möglichkeit, anstelle des ursprünglichen ein vielleicht einfacheres duales Modell zu behandeln.

6.3 Weitere exakt lösbare Modelle

Wir erwähnen einige weitere Modelle, die exakt lösbar sind. Für Details siehe Lavis und Bell etc.

(a) *6-Vertex-F-Modell*. Dies ist ein weiteres exakt lösbares zweidimensionales Modell, das weniger bekannt ist als das Ising-Modell. Es besteht aus einem Quadratgitter, dessen *Kanten* mit Pfeilen („Dipolen“) dekoriert sind, so dass *genau zwei* Pfeile zu jedem Gitterplatz hin zeigen:



Oben: mögliche Konfiguration des 6-Vertex-Modells. Unten: die sechs erlaubten „Vertizes“, d.h. Konfigurationen der Gitterplätze. Die verschiedenen Vertizes haben Energien e_i , $i = 1, \dots, 6$. Im *F-Modell* ist speziell

$$e_1 = e_2 = e_3 = e_4 = \epsilon > 0, \quad (6.55)$$

$$e_5 = e_6 = 0. \quad (6.56)$$

Die beiden rechten Vertizes sind also bevorzugt \rightarrow bevorzugt antiparallele Ausrichtung der Pfeile. Dieses System stellt ein einfaches Modell für *Eis* dar:

- Gitterplätze stehen für Sauerstoff,
- Pfeilspitzen stehen für Wasserstoff.

Natürlich sind jeweil zwei Wasserstoff-Atome nahe an einem Sauerstoff-Atom. Da sich die Bindungselektronen bevorzugt am Sauerstoff aufhalten, ist das System *antiferroelektrisch*. Man kann es auch mit einem äußeren (elektrischen) Feld exakt behandeln, im Unterschied zum Ising-Modell für $d = 2$. Die Lösung erfolgt mit der Transfermatrix-Methode.

Was dieses Modell besonders interessant macht, ist, dass es vermutlich zu *derselben Universalitätsklasse wie das XY-Modell* gehört (genauer zum dualen Modell zum XY-Modell), das man nicht exakt lösen kann. Die exakte Lösung des F-Modells kann daher als Test der Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Theorie (siehe 7.5) für das XY-Modell dienen.

Insbesondere findet man einen Phasenübergang der Ordnung unendlich bei einer endlichen Temperatur T_c , d.h. alle Ableitungen der thermodynamischen Potentiale nach den natürlichen Variablen sind stetig.

(b) *Sphärisches Modell*. Da das dreidimensionale Ising-Modell nicht exakt behandelt werden konnte, wurde von Kac als Näherung das *Sphärische Modell* eingeführt. Es ist – für Wechselwirkungen nächster Nachbarn – definiert durch die Hamilton-Funktion

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (6.57)$$

aber nun anstatt mit der Nebenbedingung $|s_i| = 1$ mit der *viel schwächeren* Bedingung

$$\sum_i s_i^2 = N, \quad (6.58)$$

wobei N die Zahl der Gitterplätze ($N \rightarrow \infty$) ist. Nun können die einzelnen Spin beliebige reelle Werte annehmen, solange nur ihre „Gesamtlänge“ konstant bleibt. Diese Nebenbedingung führt eine

implizite langreichweitige Wechselwirkung der s_i ein, die das kritische Verhalten ändert. Das Modell ist eng verwandt mit einem System von Spins mit *unendlich vielen Komponenten*. Es läßt sich für alle Dimensionen d und Gittertypen exakt lösen.

Wir betrachten das einfach kubische Gitter für $d = 3$:

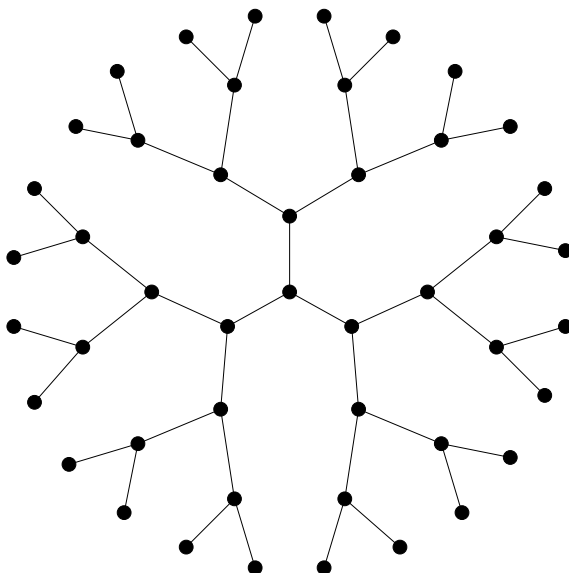
- Phasenübergang bei $k_B T_c \approx 3.957 J$ (analytisch durch spezielle Funktionen gegeben)
- spezifische Wärme C_h bei $h = 0$ ist konstant $C_h = k_B/2$ für $T \leq T_c$ und ist stetig bei T_c
- Suszeptibilität divergiert für *alle* $T \leq T_c$
- Korrelationsfunktion der Fluktuationen für *alle* $T \leq T_c$ ist $\mathcal{G} \sim 1/|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^{d-2}$ (Korrelationsfunktion der Spins selbst ist langreichweitig, da $\langle s_i \rangle \neq 0$) $\rightarrow \xi = \infty$ für $T \leq T_c$

Die Exponenten sind unten zusammengefaßt.

(c) Modelle auf dem *Bethe-Gitter*. Ein Bethe-Gitter ist ein Graph, in dem jeder Platz („Knoten“) z nächste Nachbarn hat, und der *keine geschlossenen Schleifen* enthält. Es ist $z \geq 3$. Die Anzahl der Knoten mit einem Abstand von höchstens $R \geq 2$ entlang der Kanten von einem bestimmten Knoten aus ist (die Gitterkonstante sei $a = 1$)

$$n_R = 1 + z[1 + (z-1)^1 + (z-1)^2 + \dots + (z-1)^R] = 1 + z \frac{(z-1)^{R+1} - 1}{z-2} \equiv \mathcal{O}(R^d). \quad (6.59)$$

Offenbar nimmt n_R *exponentiell* mit R zu \rightarrow die Dimension ist $d = \infty$. Die Dimension unendlich haben Modelle auf einem Bethe-Gitter mit der *Molekularfeld-Näherung* gemein, siehe Kap. 3. In einer Molekularfeld-Theorie wechselwirkt jeder Spin ja mit allen anderen.



Teil eines Bethe-Gitters mit $z = 3$ nächsten Nachbarn.

Für Modelle auf dem Bethe-Gitter mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen erhält man dieselben Exponenten, wie in der Landau- und Molekularfeld-Theorie.

Zusammenfassung der kritischen Exponenten

	α	α'	β	γ	γ'	δ	η	ν	ν'
1D Ising-Modell	$-\infty$	–	–	∞	–	–	1	∞	–
2D Ising-Modell	0 (log)	0 (log)	1/8	7/4	7/4	15	1/4	1	1
3D Spärisches Modell	0 (Kn)	0 (Kn)	1/2	2	–	5	0	1	–
Landau-Theorie Bethe-Ising-Modell	0 (Sp)	0 (Sp)	1/2	1	1	3	0	1/2	1/2

log: logarithmische Singularität, Sp: Sprung, Kn: Knick.

Kapitel 7

Renormierungsgruppen-Theorie

7.1 Skalenhypothese

7.1.1 Skalenbeziehungen

Die *Skalenhypothese* lautet:

Nah an einem kontinuierlichen Phasenübergang werden die Eigenschaften eines Systems ausschließlich von den dort divergierenden (kritischen) Größen sowie von den externen Feldern bestimmt.

Sie ist *plausibel* und experimentell vielfach bestätigt. Beispiele:

- die einzige relevante Längenskala ist die Korrelationslänge ξ , mikroskopische Längen (Gitterkonstanten, Reichweiten von Wechselwirkungen...) gehen nicht ein
- die einzige relevante Energie ist die *reduzierte Temperatur* $t := (T - T_c)/T_c$

Wenn eine Größe, z.B. das *exakte* Gibbs-Potential G , nur von *einer* Energie (nämlich t) abhängt, muss G eine *homogene* Funktion von t sein, ansonsten würde G noch eine andere Längenskala enthalten (exp, ln, ...). Für konstanten Druck gilt demnach:

$$\lambda G(t, H) = G(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) \quad (7.1)$$

für *beliebiges* λ . Hieraus kann man *Skalenbeziehungen*, d.h. Beziehungen zwischen den kritischen Exponenten, herleiten:

(a) Die Magnetisierung ist

$$\begin{aligned} \langle M(t, H) \rangle &= -\frac{\partial G(t, H)}{\partial H} = -\lambda^{-1} \frac{\partial G(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H)}{\partial H} \\ &= -\lambda^{a_H-1} G^{(0,1)}(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) = \lambda^{a_H-1} \langle M(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) \rangle. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Für $H = 0$ und die spezielle Wahl $\lambda = (-t)^{-1/a_t}$:

$$\langle M(t, 0) \rangle = (-t)^{(1-a_H)/a_t} \underbrace{\langle M(-1, 0) \rangle}_{\text{const}}. \quad (7.3)$$

Mit $\langle M(t, 0) \rangle \sim (-t)^\beta$ für $T \rightarrow T_c^-$:

$$\beta = \frac{1 - a_H}{a_t}. \quad (7.4)$$

Entsprechend für $t = 0$ und die Wahl $\lambda = H^{-1/a_H}$:

$$\langle M(0, H) \rangle = H^{(1-a_H)/a_H} \langle M(0, 1) \rangle. \quad (7.5)$$

Mit $\langle M(0, H) \rangle \sim H^{1/\delta}$ für $H \rightarrow 0$:

$$\delta = \frac{a_H}{1 - a_H}. \quad (7.6)$$

Es folgt

$$a_t = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\delta + 1}, \quad (7.7)$$

$$a_H = \frac{\delta}{\delta + 1}. \quad (7.8)$$

Die Suszeptibilität ist

$$\begin{aligned} \chi_T &= -\frac{\partial^2 G(t, H)}{\partial H^2} = -\lambda^{-1} \frac{\partial^2 G(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H)}{\partial H^2} \\ &= \lambda^{2a_H - 1} \chi_T(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) \end{aligned} \quad (7.9)$$

und für $H = 0$, $t < 0$ mit der Wahl $\lambda = (-t)^{1/a_t}$:

$$\chi_T(t, 0) = (-t)^{(1-2a_H)/a_t} \chi_T(-1, 0) \quad (7.10)$$

Da $\chi_T(t, 0) \sim (-t)^{-\gamma'}$, folgt

$$\gamma' = \frac{2a_H - 1}{a_t}. \quad (7.11)$$

Daraus ergibt sich die Skalenbeziehung

$$\gamma' = \beta(\delta - 1). \quad (7.12)$$

Analog für $t > 0$ ($T > T_c$):

$$\chi_T(t, 0) = t^{(1-2a_H)/a_t} \chi_T(+1, 0), \quad (7.13)$$

woraus folgt

$$\gamma = \frac{2a_H - 1}{a_t} = \gamma'. \quad (7.14)$$

Da i.A. $\chi_T(-1, 0) \neq \chi_T(+1, 0)$, sind die Vorfaktoren in $\chi_T \sim \dots$ typischerweise für $t > 0$, $t < 0$ verschieden.

(b) Ähnlich folgt aus der Skalenhypothese, dass

$$\alpha = \alpha', \quad (7.15)$$

wobei $C_H(t, 0) \sim (-t)^{-\alpha'}$ für $t < 0$ etc., sowie

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (7.16)$$

In 1.3.3 hatten wir die exakte *Rushbrooke-Ungleichung* $\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2$ gefunden. Unter der Voraussetzung der Skalenhypothese gilt diese also sogar als *Gleichung*.

Skalierte Zustandsgleichung

Einsetzen der Ergebnisse in

$$G(t, H) = \lambda^{-1} G(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H) \quad (7.17)$$

mit der Wahl $\lambda = |t|^{-1/a_t} = |t|^{\alpha-2}$ ergibt

$$G(t, H) = |t|^{2-\alpha} X_0(H/|t|^\Delta) \quad \text{mit} \quad \Delta = a_H/a_t = \beta + \gamma. \quad (7.18)$$

- X_0 ist eine unbekanntes *Skalenfunktion*, die nur von *einer* Variablen $H/|t|^\Delta$ abhängt (X_0 ist i.A. für $T > T_c$ und $T < T_c$ verschieden)
- *Delta* heißt auch *gap exponent*

Wichtig: die Abhängigkeit von nur *einer* Variablen ist eine nicht-triviale, experimentell überprüfbare Aussage.

Für die Magnetisierung erhalten wir entsprechend

$$\langle M(t, H) \rangle = |t|^\beta X_1(H/|t|^\Delta). \quad (7.19)$$

Diese Gleichung heißt *skalierte Zustandsgleichung*. Sie kann durch Auftragung von $M(t, H)/|t|^\beta$ gegen $H/|t|^\Delta$ überprüft werden. Alle Daten, zumindest für kleine t , H , sollten auf einer Kurve X_1 liegen. Genauer sind die Skalenfunktionen i.A. für $T < T_c$ und $T > T_c$ verschieden. Die Skaleneigenschaft ist an verschiedenen Substanzen experimentell bestätigt worden.

Für die Suszeptibilität ergibt sich schließlich

$$\chi_T = |t|^{-\gamma} X_2(H/|t|^\Delta). \quad (7.20)$$

7.1.2 Hyperskalierung

Als nächstes betrachten wir die Korrelationsfunktion \mathcal{G} der Fluktuationen. Wir hatten in 4.2.4 gesehen, dass bei $t = 0$ die Korrelationsfunktion die Form

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) \sim |\mathbf{x}|^{-(d-2+\eta)} \quad (7.21)$$

hat. \mathcal{G} ist offensichtlich eine homogene Funktion von \mathbf{x} . Für $t \neq 0$ ist dagegen

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}|^{-(d-2+\eta)} Y(|\mathbf{x}|/\xi), \quad (7.22)$$

wobei Y für große Argumente exponentiell abfällt. Wenn das thermodynamische Potential, z.B. $G(t, H)$, homogen ist, muss auch \mathcal{G} homogen sein. \mathcal{G} hängt jedoch von einer weiteren Variablen $r = |\mathbf{x}|$ ab. Daher gilt allgemein:

$$\lambda \mathcal{G}(r, t, H) = \mathcal{G}(\lambda^{a_r} r, \lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H). \quad (7.23)$$

Wir betrachten den Fall $H = 0$:

$$\mathcal{G}(r, t) = \lambda^{-1} \mathcal{G}(\lambda^{a_r} r, \lambda^{a_t} t). \quad (7.24)$$

Für $t = 0$ und die Wahl $\lambda = r^{-1/a_r}$ erhält man

$$\mathcal{G}(r, 0) = r^{1/a_r} \mathcal{G}(1, 0) \equiv \text{const} \times r^{-(d-2+\eta)}, \quad (7.25)$$

also

$$a_r = -\frac{1}{d-2+\eta}. \quad (7.26)$$

Andererseits gilt für große r :

$$\frac{\partial}{\partial r} \ln \mathcal{G}(r, t) \cong -\frac{1}{\xi(t)} \sim -t^\nu \quad (7.27)$$

für $t > 0$ (für $t < 0$ entsprechend). Es gilt

$$\xi^{-1}(t) = -\frac{\partial}{\partial r} \ln \mathcal{G}(r, t) = -\frac{\partial \mathcal{G}(r, t) / \partial r}{\mathcal{G}(r, t)} = \lambda^{a_r} \xi^{-1}(\lambda^{a_t} t). \quad (7.28)$$

Mit $\lambda = t^{-1/a_t}$ folgt

$$\xi^{-1}(t) = t^{-a_r/a_t} \xi^{-1}(+1) \sim t^\nu \quad (7.29)$$

und damit

$$a_t = -a_r/\nu = \frac{1}{(d-2+\eta)\nu}. \quad (7.30)$$

(a) Um in Kontakt mit den obigen Skalenbeziehungen zu kommen, betrachten wir die homogene Suszeptibilität

$$\begin{aligned} \chi_T(t, H=0) &\sim T^{-1} \int d^d x \mathcal{G}(\mathbf{x}, t) = T^{-1} \int d^d x |\mathbf{x}|^{-(d-2+\eta)} Y(|\mathbf{x}|/\xi) \\ &= T^{-1} \Omega_d \int dr r^{1-\eta} Y(r/\xi) = T^{-1} \Omega_d \xi^{2-\eta} \underbrace{\int du u^{1-\eta} Y(u)}_{\text{const}}, \end{aligned} \quad (7.31)$$

also

$$\chi_T(t, H=0) \sim \xi^{2-\eta} \sim t^{-(2-\eta)\nu} \equiv t^{-\gamma} \quad \Rightarrow \quad \gamma = (2-\eta)\nu \quad (7.32)$$

für $t > 0$ und entsprechend $\gamma' = (2-\eta)\nu'$ für $t < 0$.

(b) Anstatt für \mathcal{G} kann man das Skalengesetz analog für die Korrelationsfunktion \mathcal{D} des Ordnungsparameters herleiten,

$$\mathcal{D}(r, t) = \lambda^{-1} \mathcal{D}(\lambda^{a_r} r, \lambda^{a_t} t). \quad (7.33)$$

Für $t \geq 0$ ist $\mathcal{D} \equiv \mathcal{G}$ und daher treten dieselben Skalenexponenten a_r und a_t auf. Andererseits gilt für $t < 0$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \mathcal{D}(r, t) = \langle M(t, H=0) \rangle^2 \sim (-t)^{2\beta} \quad (7.34)$$

Dies nutzen wir nun aus: mit der Wahl $\lambda = (-t)^{-1/a_t}$ ist

$$\langle M(t) \rangle^2 = \mathcal{D}(\infty, t) = (-t)^{1/a_t} \mathcal{D}(\infty, -1) = (-t)^{1/a_t} \langle M(-1) \rangle^2, \quad (7.35)$$

also

$$(-t)^{2\beta} \sim (-t)^{(d-2+\eta)\nu} \quad (7.36)$$

$$\Rightarrow 2\beta = (d-2+\eta)\nu. \quad (7.37)$$

- Diese Skalenbeziehung enthält die *Dimension* d . Solche Beziehungen heißen *Hyperskalenbeziehungen*.
- Sie gilt für die Landau-Exponenten nur bei der oberen kritischen Dimension d_c (ϕ^4 -Modell: $2/2 = (4-2+0)/2$).
- Hyperskalenbeziehungen gelten für *fluktuationsdominierte* Übergänge.

Die Skalenbeziehungen können noch zu weiteren Gleichungen kombiniert werden, z.B. den Hyperskalenbeziehungen

$$\gamma + 2\beta = d\nu \quad \text{und} \quad \alpha = 2 - d\nu. \quad (7.38)$$

Insgesamt ergibt sich:

- die Exponenten für $T > T_c$ und $T < T_c$ sind gleich,
- falls Hyperskalierung erfüllt ist, existieren 4 unabhängige Skalenbeziehungen zwischen 6 Exponenten $(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, \nu) \rightarrow 2$ unabhängige Exponenten, *two-scaling-factor universality* – nicht überraschend, wenn G nur von 2 Variablen mit je einem Skalensexponenten abhängt!

7.2 Renormierungsgruppe: Einführung

Alle Skalenbeziehungen ergeben sich aus der Skalenhypothese. Diese Hypothese wird durch die *Renormierungsgruppen-Theorie* weiter untermauert, mit der darüberhinaus das kritische Verhalten vieler realistischer Modelle untersucht werden kann. Wesentliche Idee:

Universelle Eigenschaften physikalischer Systeme beruhen oft auf Symmetrien (Translation, Rotation, Zeitinvarianz, Eichung, Spin, Isospin, SU(3), ...). Können die universellen kritischen Eigenschaften ebenfalls auf eine zu Grunde liegende Symmetrie zurückgeführt werden? Ein guter Kandidat ist die *Skaleninvarianz*.

Zunächst betrachten wir eine heuristische Form der Renormierung, die auf Kadanoff zurückgeht.

7.2.1 Effektiver Hamiltonian und Blockspins

Wir haben gesehen, dass Fluktuationen auf sehr kurzen Längenskalen viel Energie kosten. Sind sind daher i.A. nicht angeregt und tragen nichts zum kritischen Verhalten bei. Dies kann man ausnutzen, indem man im Hamilton-Operator oder in der Hamilton-Funktion über Freiheitsgrade ϕ in einem Volumen V_{mic} mittelt (*coarse graining*),

$$\tilde{\phi} = V_{\text{mic}}^{-1} \int_{V_{\text{mic}}} d^d x \phi(\mathbf{x}) \quad (7.39)$$

(V_{mic} ist groß gegen mikroskopische Längen, aber klein gegen die Systemgröße). $\tilde{\phi}$ enthält keine Fluktuationen auf Längenskalen kleiner als die Größe von V_{mic} . Die Energie ausgedrückt durch das makroskopische Feld $\tilde{\phi}$ heißt *effektiver Hamiltonian* oder *Block-Hamiltonian*,

$$\tilde{H}[\tilde{\phi}] = \sum_{\mathbf{x}} \tilde{\mathcal{H}}(\tilde{\phi}(\mathbf{x})), \quad (7.40)$$

wobei \mathbf{x} die Mittelpunkte der Volumina V_{mic} sind. Falls die ϕ Spins beschreiben, nennt man die $\tilde{\phi}$ *Blockspins*.

Symmetrie-Überlegungen wie in 2.2.2 führen auf eine Landau-Form für \tilde{H} , z.B. für ein ϕ^4 -Modell:

$$\tilde{H} = \sum_{\mathbf{x}} \left[\frac{\alpha}{2} \tilde{\phi}^2 + \frac{\beta}{4} \tilde{\phi}^4 \right] + \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} \frac{\gamma}{2a^2} \left[\tilde{\phi}(\mathbf{x}) - \tilde{\phi}(\mathbf{x}') \right]^2 \quad (7.41)$$

(a : Gitterkonstante der \mathbf{x}).

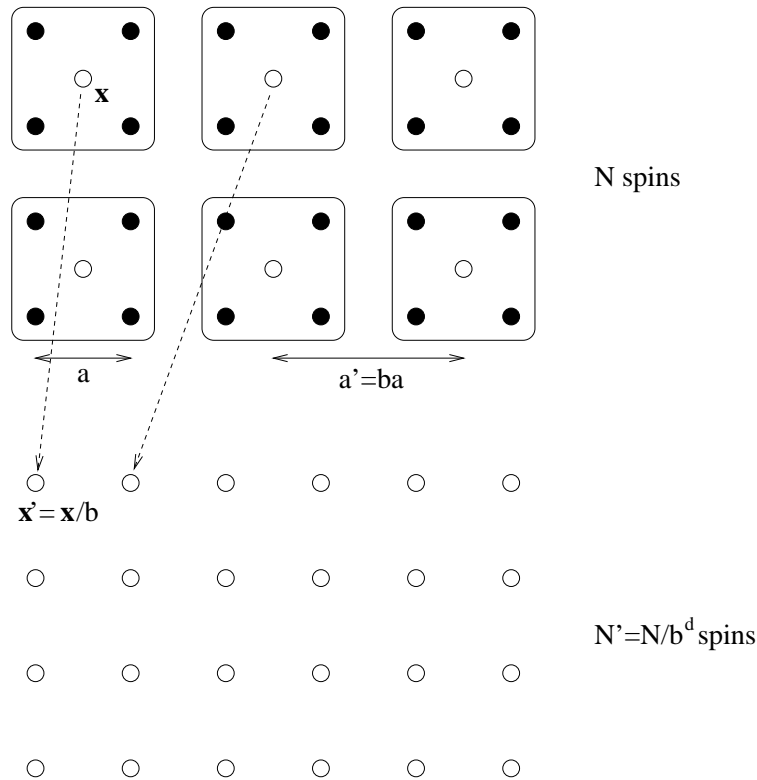
- Fluktuationen auf kurzen Längenskalen sind in den Parametern enthalten
- natürliche Erklärung des cutoffs Λ : verhindert *Doppelzählung* von Fluktuationen
- Gittermodell auch für ursprünglich kontinuierliches Feld
- man erhält ein *klassisches* Modell auch für Quantensysteme

7.2.2 Kadanoff-Konstruktion

Wir betrachten einen uniaxialen Ferromagneten bestehend aus Blockspins $s(\mathbf{x})$ auf einem d -dimensionalen hyperkubischen Gitter mit N Plätzen und der Gitterkonstanten a . Die Verallgemeinerung ist offensichtlich. Der Block-Hamiltonian sei

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s(\mathbf{x}_i) s(\mathbf{x}_j), \quad (7.42)$$

wo jeder Bindung einmal gezählt wird. Kadanoff *vermutete*, dass das System in gewissem Sinne unter einer *Renormierungsgruppen-Transformation* invariant ist. Sie besteht aus zwei Schritten: der eigentlichen *Kadanoff-Transformation* und einer *Reskalierung*.



Kadanoff-Transformation auf dem Quadratgitter für den Skalierungsparameter $b = 2$. Oben: ursprüngliches Gitter und Gitter der neuen Blockspins. Unten: neues Gitter nach Reskalierung.

(a) Zunächst führen wir die *Kadanoff-Transformation* durch, d.h. eine *Dezimierung* der Blockspins:

- teile das Gitter in $N' = b^{-d}N$ Zellen ein, so dass die Zellen wieder ein hyperkubisches Gitter bilden (b ist der *Skalierungsparameter*)
- mittele s über die b^d Plätze einer jeden Zelle,

$$\tilde{s}(\mathbf{x}) = b^{-d} \sum_{\mathbf{y} \in \text{Zelle um } \mathbf{x}} s(\mathbf{y}) \quad (7.43)$$

- die gemittelten Spins \tilde{s} bilden ein Gitter mit der Gitterkonstanten $a' = ba$

(b) Als zweiter Schritt erfolgt eine *Reskalierung*:

- messe Längen im neuen Gitter in Einheiten der neuen Gitterkonstante $a' \rightarrow$ insbesondere $\mathbf{x}' = \mathbf{x}/b$

- führe neue Blockspins ein:

$$s'(\mathbf{x}') = s'(\mathbf{x}/b) = b^\omega \tilde{s}(\mathbf{x}) \quad (7.44)$$

mit noch unbekanntem Skalensexponenten ω (man läßt oft die Tilde fort)

Diese Schritte werden *iteriert* und man betrachtet das Verhalten nach vielen Iterationen.

Kadanoff-Transformation und Reskalierung für irgendeine Größe A schreibt man symbolisch als

$$A' = R_b A \quad (7.45)$$

mit dem Skalierungsparameter b . Es gilt

$$R_{b_1 b_2} = R_{b_1} R_{b_2}, \quad (7.46)$$

da diese Beziehung für Kadanoff-Transformation und Reskalierung ($A' = b^{\lambda_A} \tilde{A}$) einzeln gilt. Damit beschreibt R_b eine *kommutative Halbgruppe*:

- assoziativ: $(R_{b_1} R_{b_2}) R_{b_3} = R_{b_1 b_2 b_3} = R_{b_1} (R_{b_2} R_{b_3})$
- kommutativ: $R_{b_1} R_{b_2} = R_{b_1 b_2} = R_{b_2} R_{b_1}$
- i.A. *keine Inversion*

Diese Halbgruppe nennt man *Renormierungsgruppe*.

Wie verhält sich das Blockspin-System unter Renormierung? Wir erwarten:

- *geordnete Phase*: Fluktuationen auf der Längenskala ξ um das geordnete Gleichgewicht, Reskalierung *verkleinert* $\xi \rightarrow \xi/b \rightarrow$ System strebt zum perfekt geordneten Zustand (\Leftrightarrow man muss ξ' bei der Reskalierung vergrößern, um es invariant zu halten)
- *ungeordneten Phase*: Fluktuationen auf der Längenskala ξ um das ungeordnete Gleichgewicht, Reskalierung *verkleinert* $\xi \rightarrow \xi/b \rightarrow$ System strebt zum perfekt ungeordneten Zustand
- *kritischer Punkt*: $\xi = \infty$ invariant unter Reskalierung, System ist skaleninvariant, ändert sich nicht wesentlich

Kadanoff hat nun *vermutet*, dass der Hamiltonian der *neuen* Blockspins dieselbe Form wie der ursprüngliche hat. Dann läßt sich durch Änderung (*Renormierung*) der Parameter erreichen, dass beide Hamiltonians übereinstimmen,

$$H' \equiv H. \quad (7.47)$$

Die genaue Bedeutung dieser Forderung besprechen wir noch. Dann bleibt H auch unter beliebig viele Iterationsschritten invariant. Die Spins und äußeren Felder sollen so *skaliert* werden, dass diese Forderung erfüllt ist. Beispiel: wähle ω in $s'(\mathbf{x}') = b^\omega \tilde{s}(\mathbf{x})$ entsprechend. Wir wollen jetzt diese Skalierung diskutieren.

Wenn $H' = H$ gilt, sind auch die Korrelationsfunktionen gleich. Insbesondere ist für $T = T_c$

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle s(\mathbf{x}_1) s(\mathbf{x}_2) \rangle \sim |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^{-(d-2+\eta)}. \quad (7.48)$$

Für die Blockspins gilt

$$\langle s'(\mathbf{x}_1/b) s'(\mathbf{x}_2/b) \rangle = b^{2\omega} \langle \tilde{s}(\mathbf{x}_1) \tilde{s}(\mathbf{x}_2) \rangle = b^{2\omega} \langle s(\mathbf{x}_1) s(\mathbf{x}_2) \rangle \quad (7.49)$$

(der letzte Schritt ist erlaubt, da $a' \ll \xi$), also

$$\left| \frac{\mathbf{x}_1}{b} - \frac{\mathbf{x}_2}{b} \right|^{-(d-2+\eta)} = b^{2\omega} |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|^{-(d-2+\eta)} \quad (7.50)$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{1}{2}(d-2+\eta). \quad (7.51)$$

ω ist der Skalensexponent der Spins.

Schließlich müssen wir noch feststellen, wie ein äußeres konjugiertes Feld h skaliert. Wir nehmen an, dass $h(\mathbf{x})$ sich räumlich langsam ändert, so dass es sinnvoll ist, ein über die Zellen gemitteltes \tilde{h} zu betrachten. Der Energiebeitrag von h soll sich nicht ändern:

$$H_h = - \sum_{\mathbf{x}} h(\mathbf{x}) s(\mathbf{x}) = -b^d \sum_{\mathbf{x}} \tilde{h}(\mathbf{x}) \tilde{s}(\mathbf{x}) \equiv -b^d \sum_{\mathbf{x}'} b^{-\lambda} h'(\mathbf{x}') b^{-\omega} s'(\mathbf{x}') \equiv - \sum_{\mathbf{x}'} h'(\mathbf{x}') s'(\mathbf{x}') \quad (7.52)$$

und der Skalensexponent λ von h ist

$$\lambda = d - \omega \quad (7.53)$$

$$\Rightarrow h'(\mathbf{x}') = b^{d-\omega} \tilde{h}(\mathbf{x}). \quad (7.54)$$

Analog kann man die Skaleneigenschaften jeder Funktion der Spins betrachten (z.B. die Energiedichte, höhere Potenzen s^n oder im Heisenberg-Modell Anisotropien wie $s_z s_z$). Sei Φ_α eine solche Funktion, die gemäß

$$\Phi'_\alpha(\mathbf{x}') = b^{\omega_\alpha} \tilde{\Phi}_\alpha(\mathbf{x}) \quad (7.55)$$

skaliert. Man kann ein zu Φ_α konjugiertes Feld h_α einführen, dass nach Definition zu einem Term $-\sum h_\alpha \Phi_\alpha$ im Block-Hamiltonian führt. Dann ergibt sich

$$h'_\alpha(\mathbf{x}') = b^{\lambda_\alpha} \tilde{h}_\alpha(\mathbf{x}) \quad (7.56)$$

mit dem Exponenten $\lambda_\alpha = d - \omega_\alpha$.

Schließlich betrachten wir noch die Skalierung der reduzierten Temperatur $t = (T - T_c)/T_c$:

$$t' = b^{\lambda_t} t. \quad (7.57)$$

Weiter skaliert die Korrelationslänge, wie jede Länge, gemäß $\xi' = \xi/b$. Da $\xi \sim t^{-\nu}$ für $t > 0$, folgt $b^{-\nu\lambda_t} t^{-\nu} \sim b^{-1} t^{-\nu}$, also

$$\lambda_t = 1/\nu \quad (7.58)$$

$$\Rightarrow t' = b^{1/\nu} t \quad (7.59)$$

und entsprechend für $t < 0$ ($\nu = \nu'$).

Zusammenfassung: *falls* die ursprünglichen und die neuen Blockspins von demselben Hamiltonian beschrieben werden, folgt das Skalenverhalten automatisch. Kadanoffs Konstruktion nimmt diese Voraussetzung ohne Beweis an und enthält *keine Methode*, die Renormierung des Hamiltonians tatsächlich zu *berechnen*.

7.2.3 Relevanz von Feldern, Korrekturen zum Skalenverhalten

Falls für ein konjugiertes Feld h_α gilt $\lambda_\alpha < 0$, so strebt es bei der Renormierung gegen Null ($h' = b^{\lambda_\alpha} h$). Wir erwarten, dass das kritische Verhalten dann nicht von h_α abhängt. Allgemein definiert man:

- falls $\lambda_\alpha > 0$ ist das Feld h_α *relevant*
- falls $\lambda_\alpha < 0$ ist das Feld h_α *irrelevant*
- falls $\lambda_\alpha = 0$ ist das Feld h_α *marginal*

Man sagt auch, die Spin-Funktion Φ_α sei relevant, irrelevant oder marginal je nach dem Wert von $\lambda_\alpha = d - \omega_\alpha$.

Wegen $H' = H$ stimmen auch die Gibbs'schen freien Energien überein, $G' = G$. Die natürlichen Variablen von G sind die Temperatur und die äußeren Felder:

$$G = G(t, h, h_\alpha) \equiv \sum_{\mathbf{x}} g(\mathbf{x}). \quad (7.60)$$

Aus $G' = G$ folgt für die *Dichte* g die Skalenbeziehung

$$g(t, h, h_\alpha) = b^{-d} g(b^{1/\nu} t, b^\lambda h, b^{\lambda_\alpha} h_\alpha). \quad (7.61)$$

Mit der Wahl $b = |t|^{-\nu}$ erhalt man die Skalenform

$$g(t, h, h_\alpha) = |t|^{d\nu} X(h|t|^{-\Delta}, h_\alpha|t|^{-\Delta_\alpha}) \quad \text{mit} \quad (7.62)$$

$$\Delta = \lambda\nu = \gamma + \beta \quad \text{wie oben, und} \quad (7.63)$$

$$\Delta_\alpha = \lambda_\alpha\nu. \quad (7.64)$$

Für ein *irrelevantes* Feld h_α mit $\lambda_\alpha < 0$ ($\Delta_\alpha < 0$) wird $h_\alpha|t|^{-\Delta_\alpha}$ für $T \rightarrow T_c$ beliebig klein. Daher ist h_α dann für das kritische Verhalten unwesentlich: es beeinflusst nicht die führenden Divergenzen bei T_c , d.h. die *kritischen Exponenten*.

Das kritische Verhalten ändert sich nicht, wenn man irrelevante Felder hinzufügt oder entfernt \rightarrow alle solchen Modelle gehören zu derselben *Universalitätsklasse*.

Das heißt *nicht*, dass irrelevante Felder keine Beiträge im kritischen Bereich liefern. Betrachte z.B. ein System mit nur einem irrelevanten äußeren Feld h_1 mit $\Delta_1 = \lambda_1\nu < 0$: Aus $g(t, h_1) = |t|^{d\nu} X(h_1|t|^{-\Delta_1})$ erhält man für die magnetische Suszeptibilität (siehe 7.1.1)

$$\chi_T = |t|^{-\gamma} X_2(h_1|t|^{-\Delta_1}). \quad (7.65)$$

Für $t \rightarrow 0$ geht $h_1|t|^{-\Delta_1} \rightarrow 0$ und wir entwickeln χ_T in dieser Größe:

$$\chi_T \cong \chi_0|t|^{-\gamma} + \chi_1 h_1 |t|^{-\gamma-\Delta_1} + \dots \quad (7.66)$$

Der Exponent $-\gamma - \Delta_1 > -\gamma$, so dass der erste Term die führende Divergenz mit dem kritischen Exponenten γ liefert. Der zweite Term kann jedoch ebenfalls *divergieren*, falls $\gamma + \Delta_1 > 0$. Terme dieser Art heißen *Korrekturen zum Skalenverhalten*. Sie erschweren die experimentelle Bestimmung von Exponenten.

7.2.4 Andere Methoden der Dezimierung

Bevor wir untersuchen, wie der renormierte Hamiltonian tatsächlich bestimmt werden kann, betrachten wir noch zwei weitere Methoden der *Dezimierung der Blockspins*. Welche Methode günstig ist, hängt vom Modell ab.

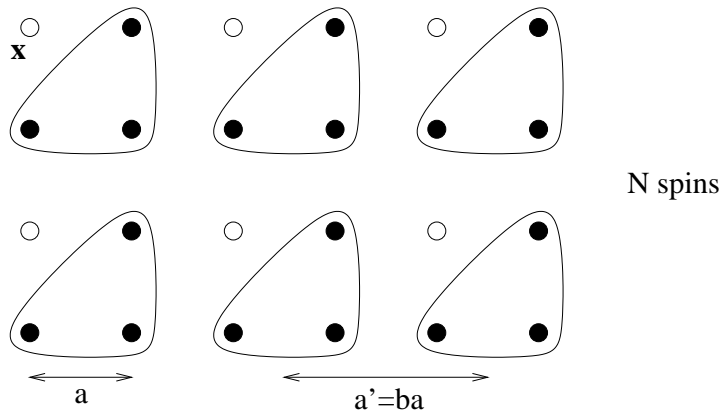
Ausintegration von Blockspins

Zum einen kann man versuchen, einen Teil der Spins „*auszuintegrieren*“, d.h. die Summation über diese Spins in der Zustandssumme auszuführen:

$$Z = \sum_{\{s(\mathbf{x})|\mathbf{x} \in \mathbf{X}\}} e^{-\beta H[s(\mathbf{x})]} = \sum_{\{s(\mathbf{x})|\mathbf{x} \in \mathbf{X}'\}} \sum_{\{s(\mathbf{y})|\mathbf{y} \notin \mathbf{X}'\}} e^{-\beta H[s(\mathbf{x}), s(\mathbf{y})]} \equiv \sum_{\{s(\mathbf{x})|\mathbf{x} \in \mathbf{X}'\}} e^{-\beta H'[s(\mathbf{x})]} \quad (7.67)$$

- \mathbf{X} : alle Gitterpunkte
- \mathbf{X}' : Gitterpunkte, die bei der Dezimierung erhalten bleiben

Der letzte Schritt *definiert* H' ; es ist nicht offensichtlich, ob es ein H' gibt, das diese Gleichung erfüllt.

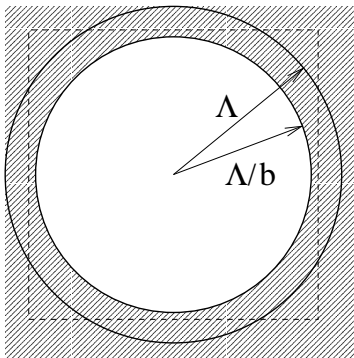


Dezimierung der Blockspins durch *Ausintegration* der Spins an den schwarz eingezeichneten Gitterpunkten, hier für $b = 2$. Als zweiter Schritt erfolgt wieder eine Reskalierung wie in der letzten Abbildung.

Renormierung im Impulsraum

Es ist oft günstiger, die Anzahl der Freiheitsgrade im *Impulsraum* zu verringern. Ein Gitter aus N Blockspins $s(\mathbf{x})$ kann äquivalent durch die Fourier-Transformierte $s(\mathbf{q})$ an N Punkten in der ersten Brillouin-Zone beschrieben werden. Diese hat das Volumen $(2\pi/a)^d$, wobei a die Gitterkonstante eines hyperkubischen Gitters ist.

- Da wir uns für große Wellenlängen *Lefttrightarrow* kleine \mathbf{q} interessieren, können wir die erste Brillouin-Zone durch eine Hyperkugel gleichen Volumens (gleichviele Zustände) ersetzen.
- Dies führt zu einem Abschneideparameter Λ mit $\Omega_d \Lambda^d/d = (2\pi/a)^d$ (Ω_d : voller Raumwinkel in d Dimensionen).



- integriere über alle $s(\mathbf{q})$ mit $\Lambda/b < q < \Lambda$
- ergibt neuen Hamiltonian mit $N' = N/b$ Freiheitsgraden und Abschneideparameter $\Lambda/b \Leftrightarrow$ neue Gitterkonstante ba
- reskaliere Längen, $\mathbf{x}' = \mathbf{x}/b$ bzw. $\mathbf{q}' = b\mathbf{q}$ ($\Lambda/b \rightarrow \Lambda$)
- reskaliere die Blockspins, $s'(\mathbf{q}') = b^{(-d-2+n)/2} s(\mathbf{q})$ (aus der Korrelationsfunktion ähnlich zu 7.2.2)

Entscheidender Vorteil: b kann eine beliebige reelle Zahl > 1 sein, insbesondere $b = 1 + \delta l$, $\delta l \ll b$.

7.3 Ising-Modell

7.3.1 Eindimensionales Ising-Modell

Als erstes Beispiel betrachten wir das eindimensionale Ising-Modell im verschwindenden äußeren Feld. Das Modell besteht aus einer Kette von Blockspins s_i , die nur die Werte $\pm q$ annehmen können. Dieses Modell ist exakt behandelbar (sogar mit Feld) und wir geben zunächst die exakte Lösung an:

Die Hamilton-Funktion ist

$$H = -J \sum_i s_i s_{i+1}. \quad (7.68)$$

Die Zustandssumme ist

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{\tilde{J} \sum_i s_i s_{i+1}} \quad \text{mit} \quad \tilde{J} := \beta J = J/k_B T. \quad (7.69)$$

Nun geht man von den N Variablen s_i zu den N Variablen

$$x_i := s_i s_{i+1} = \pm 1 \quad (7.70)$$

über, die ebenfalls unabhängig sind, da

$$s_i = x_{i-1} s_{i-1} = x_{i-1} x_{i-2} x_{i-3} \dots \quad (7.71)$$

Dann ist

$$Z = \sum_{\{x_i\}} e^{\tilde{J} \sum_i x_i} = \prod_i \sum_{x_i = \pm 1} e^{\tilde{J} x_i} = (e^{\tilde{J}} + e^{-\tilde{J}})^N = 2^N \cosh^N \tilde{J} \quad (7.72)$$

und die freie Energie pro Blockspin

$$f = -k_B T \ln \left(2 \cosh \frac{J}{k_B T} \right) \quad (7.73)$$

ist eine glatte Funktion von $T \rightarrow$ keine Anzeichen eines Phasentübergangs.

7.3.2 Behandlung des 1D Ising-Modells in der Renormierungsgruppen-Theorie

Die geeignete Methode der Dezimierung ist hier die Ausintegration von Blockspins, da dies exakt erfolgen kann und keine Probleme mit der Nebenbedingung $|s_i| = 1$ auftreten. Wir wählen den Skalierungsparameter $b = 2$. Wir schreiben die Zustandssumme als

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{\tilde{J} \sum_i s_i s_{i+1}} = \sum_{\{s_i\}} \prod_i e^{\tilde{J} s_i s_{i+1}} \quad (7.74)$$

und benutzen, dass

$$e^{\tilde{J} s_i s_{i+1}} = \frac{e^{\tilde{J}} + e^{-\tilde{J}} + s_i s_{i+1} (e^{\tilde{J}} - e^{-\tilde{J}})}{2} = \cosh \tilde{J} + s_i s_{i+1} \sinh \tilde{J} = \cosh \tilde{J} \left(1 + s_i s_{i+1} \tanh \tilde{J} \right). \quad (7.75)$$

Hieraus folgt

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \prod_i \cosh \tilde{J} \left(1 + s_i s_{i+1} \tanh \tilde{J} \right). \quad (7.76)$$

Nun summieren wir über die möglichen Zustände der Spins auf ungeraden Plätzen:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{s_{2i'}\}} \sum_{\{s_{2i'+1}\}} \prod_{2i'} \cosh^2 \tilde{J} \left(1 + s_{2i'} s_{2i'+1} \tanh \tilde{J} \right) \left(1 + s_{2i'+1} s_{2i'+2} \tanh \tilde{J} \right) \\ &= \sum_{\{s_{2i'}\}} \sum_{\{s_{2i'+1}\}} \prod_{2i'} \cosh^2 \tilde{J} \left(1 + [s_{2i'} s_{2i'+1} + s_{2i'+1} s_{2i'+2}] \tanh \tilde{J} \right. \\ &\quad \left. + s_{2i'} \underbrace{s_{2i'+1} s_{2i'+2}}_{=1} \tanh^2 \tilde{J} \right) \\ &= \sum_{\{s_{2i'}\}} \prod_{2i'} \cosh^2 \tilde{J} \left(1 + s_{2i'} s_{2i'+2} \tanh^2 \tilde{J} \right) = \sum_{\{s'_{i'}\}} \prod_{i'} \cosh^2 \tilde{J} \left(1 + s'_{i'} s'_{i'+1} \tanh^2 \tilde{J} \right), \quad (7.77) \end{aligned}$$

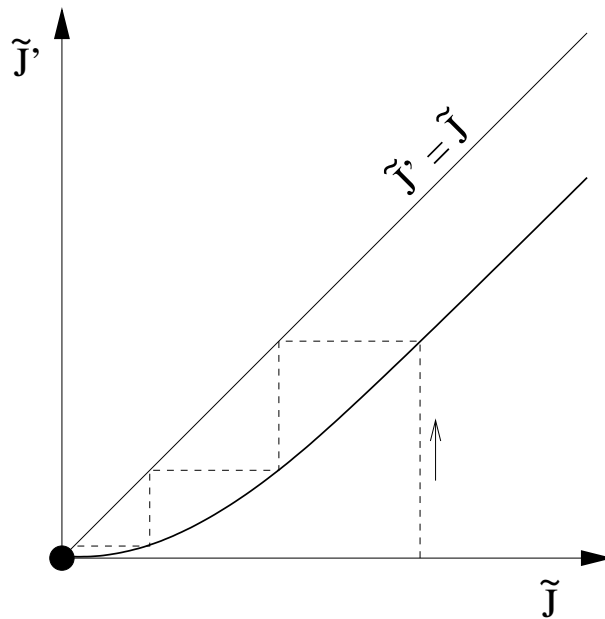
wobei im letzten Schritt nur die s_i renumeriert wurden (Reskalierung). Der Faktor $\cosh^2 \tilde{J}$ gibt nur eine Konstante in der freien Energie, die wir hier nicht beachten. Abgesehen davon sollen neue und alte Zustandssumme (oder Hamiltonian) identisch sein:

$$\sum_{\{s'_{i'}\}} \prod_{i'} \left(1 + s'_{i'} s'_{i'+1} \tanh^2 \tilde{J} \right) = \sum_{\{s'_{i'}\}} \prod_{i'} \left(1 + s'_{i'} s'_{i'+1} \tanh \tilde{J}' \right). \quad (7.78)$$

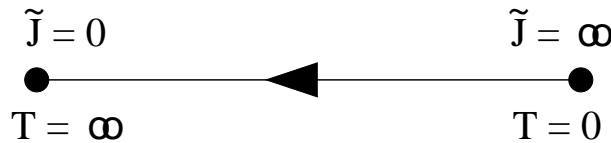
Es folgt

$$\tilde{J}' = \operatorname{artanh} \tanh^2 \tilde{J} \quad (7.79)$$

oder auch symbolisch $R_2 \tilde{J} = \operatorname{artanh} \tanh^2 \tilde{J}$.



Die Funktion $\text{artanh} \tanh^2 \tilde{J}$ sowie mehrere Iterationen R_2 für einen bestimmten Startwert \tilde{J} . Die Renormierung strebt gegen den *Fixpunkt* (ausgefüllter Kreis) $\tilde{J}^* = 0$.



Renormierungsgruppen-Fluß für das eindimensionale Ising-Modell.

- zwei *Fixpunkte*: $\tilde{J}^* = 0$ und $\tilde{J}^* = \infty$
- für $0 < \tilde{J} < \infty$ strebt \tilde{J} unter Renormierung nach $\tilde{J}^* = 0$: *attraktiver* Fixpunkt
- $\tilde{J}^* = \infty$ ist ein *repulsiver* Fixpunkt

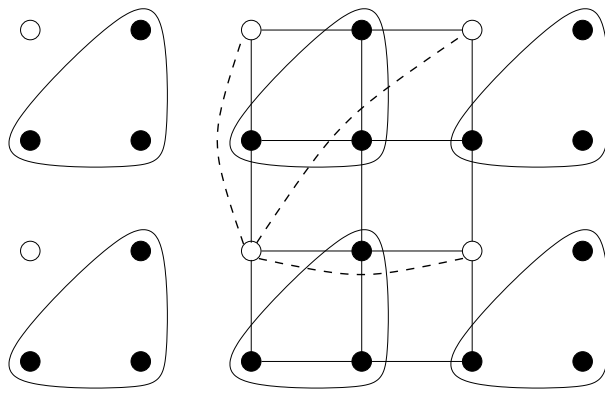
Interpretation: wenn man das System auf immer größeren Längenskalen ansieht, wird die scheinbare Kopplungsstärke J immer kleiner, oder die Temperatur T immer höher, es sei denn $T = 0$. Für alle endlichen T strebt das System gegen den ungeordneten oder *Hochtemperatur*-Fixpunkt \rightarrow für alle $T > 0$ ist das System in der ungeordneten Phase.

Einige wichtige allgemeine Begriffe:

- Die Parameter $\mu := (\mu_1, \mu_2, \dots)$, die renormiert werden, spannen den *Parameterraum* auf.
- Ein Punkt μ^* im Parameterraum, an dem $R_b \mu^* = \mu^*$ gilt, heißt *Fixpunkt*. I.A. existieren *mehrere* Fixpunkte.
- Alle Punkte μ mit $\lim_{n \rightarrow \infty} (R_b)^n \mu \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} R_{nb} \mu = \mu^*$ heißt *Attraktionsbereich* (*basin of attraction*) des Fixpunktes μ^* .
- Fixpunkte, deren Attraktionsbereich eine Umgebung des Fixpunktes umfaßt, heißen *attraktiv*.
- Fixpunkte, deren Attraktionsbereich nur den Fixpunkt selbst umfaßt, heißen *repulsiv*.
- In höherdimensionalen Parameterräumen sind Fixpunkte oft attraktiv in gewissen Richtungen und repulsiv in den übrigen, d.h. ihr Attraktionsbereich hat eine geringere Dimension als der Parameterraum.

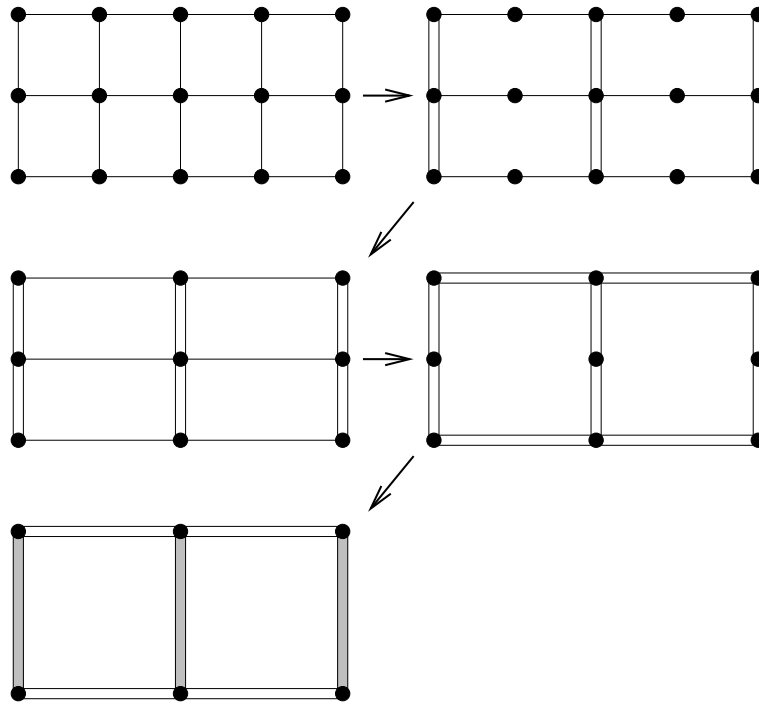
7.3.3 Mehrdimensionales Ising-Modell: Migdal-Kadanoff-Methode

Das Beispiel des eindimensionalen Ising-Modells war relativ trivial, da wir die exakte Lösung kennen. Nun versuchen wir dieselbe Renormierungsgruppen-Theorie auf das d -dimensionale Ising-Modell auf dem hyperkubischen Gitter anzuwenden.



Das Problem: nach der Ausintegration hat der neue Hamiltonian *nicht dieselbe Form* wie der alte, da zusätzliche Wechselwirkungen *übernächster Nachbarn* (und auch 4-Spin-Wechselwirkungen) auftreten.

Einer von mehreren näherungsweisen Auswegen ist die *Migdal-Kadanoff-Methode*, bei der *Bindungen verschoben* werden. Eine exakte Methode existiert nicht.



Migdal-Kadannoff-Methode am Beispiel $d = 2, b = 2$:

- verschiebe $b - 1$ von b y -Bindungen $\tilde{J}_x \rightarrow b$ -fache Bindung $b\tilde{J}_x$
- dezimiere Blockspins mit zwei Nachbarn wie in einer Dimension
- verschiebe $b - 1$ von b x -Bindungen $\tilde{J}_y \rightarrow b$ -fache Bindung $b\tilde{J}_y$
- dezimiere Blockspins mit zwei Nachbarn wie in einer Dimension
- reskaliere Gitterindizes

Nachteil: x - und y -Bindungsstärken sind nach Renormierungsschritt i.A. verschieden.

In $d = 2$ ergeben die ersten beiden Schritte

$$\tilde{J}'_y = b\tilde{J}_y, \quad \tilde{J}'_x = R_b \tilde{J}_x, \quad (7.80)$$

wobei die Verallgemeinerung von R_b für beliebige b

$$R_b \tilde{J}_p = \text{artanh} \tanh^b \tilde{J}_p \quad \text{mit } p = x, y \quad (7.81)$$

lautet (dies haben wir oben für $b = 2$ gezeigt, allgemeine Zweierpotenzen folgen trivial und für beliebige b „raten“ wir den richtigen Ausdruck). Alle vier Schritte ergeben

$$\tilde{J}'_y = R_b b \tilde{J}_y, \quad \tilde{J}'_x = b R_b \tilde{J}_x. \quad (7.82)$$

Entsprechend ist für beliebige d

$$\tilde{J}'_p = b^{d-p} R_b b^{p-1} \tilde{J}_p \quad \text{mit } p = 1, \dots, d. \quad (7.83)$$

Wieder bricht diese Transformation die Symmetrie des Gitters. Diese kann durch Mittelungen über alle äquivalenten Richtungen wieder hergestellt werden, was wir hier aber nicht betrachten.

Die Skalenrelation für \tilde{J}_p ist für beliebige reelle $b > 1$ sinnvoll. Es ist nützlich, infinitesimale Renormierungsschritte mit $b = e^{\delta l} \cong 1 + \delta l$ für $\delta l \ll q$ zu betrachten. Für diese ist

$$\begin{aligned} \tilde{J}'_p &= [1 + (d-p)\delta l] \operatorname{artanh} \left(\tanh[1 + (p-1)\delta l] \tilde{J}_p \right)^{1+\delta l} \\ &= \tilde{J}_p + (d-1)\tilde{J}_p \delta l + \frac{1}{2} (\sinh 2\tilde{J}_p) (\ln \tanh \tilde{J}_p) \delta l. \end{aligned} \quad (7.84)$$

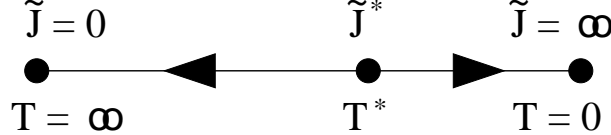
Beachte, dass diese Skalenbeziehung unabhängig von p ist, also wird die Symmetrie zwischen den verschiedenen Raumrichtungen wieder hergestellt und wir müssen nur eine Kopplung \tilde{J} betrachten. Es folgt eine Differentialgleichung für die Änderung von \tilde{J} mit der *Längenskala* l :

$$\frac{d\tilde{J}}{dl} = (d-1)\tilde{J} + \frac{1}{2} \underbrace{(\sinh 2\tilde{J}) (\ln \tanh \tilde{J})}_{<0 \text{ für } \tilde{J} > 0}. \quad (7.85)$$

Wir betrachten wieder die Fixpunkte (aus $d\tilde{J}/dl = 0$):

- $d = 1$: nur ein attraktiven Fixpunkt bei Null
- $d > 1$: ein attraktiver Fixpunkt bei Null sowie ein *repulsiver* Fixpunkt $\tilde{J}^* > 0$ (*Ising-Fixpunkt*)

Unendlich ist kein eigentlicher Fixpunkt, da $d\tilde{J}/dl \neq 0$. Aber die *relative* Änderung $\tilde{J}^{-1} d\tilde{J}/dl$ verschwindet, insofern können wir ∞ nicht ganz exakt trotzdem als Fixpunkt ansehen.



Renormierungsgruppen-Fluß für das Ising-Modell mit $d > 1$.

Interpretation des Ergebnisses: wir halten die Wechselwirkung J konstant und renormieren nur die Temperatur T . Die wahre (unrenormierte, nackte) Temperatur $T(l = 0)$ bestimmt einen Punkt im Parameterraum, d.h. hier auf dem Intervall $[0, \infty[$. Bei der Renormierung ändert sich die scheinbare Temperatur gemäß

$$\frac{dT}{dl} = -\frac{T^2}{J} \frac{d\tilde{J}}{dl} = -\epsilon T - \frac{T^2}{2J} \left(\sinh \frac{2J}{T} \right) \left(\ln \tanh \frac{J}{T} \right) \quad (7.86)$$

mit $\epsilon := d - 1$. Entwicklung bis zur zweiten Ordnung in T ergibt

$$\frac{dT}{dl} \cong -\epsilon T + \frac{1}{2} \frac{T^2}{J}. \quad (7.87)$$

Wir sehen, dass der nicht triviale Fixpunkt bei

$$T^* \cong 2\epsilon J = 2(d-1)J \quad (7.88)$$

liegt. Der neue Fixpunkt löst sich vom Tieftemperatur-Fixpunkt $T = 0$ für $d > 1$.

Die Renormierung bedeutet, dass wir das System auf immer größeren Längenskalen l ansehen. Je nachdem, ob die wahre Temperatur $T(0) > T^*$ oder $< T^*$ ist, strebt T gegen Null oder unendlich. Im ersten Fall erscheint das System nach Renormierung kälter, d.h. stärker geordnet und man ist in der geordneten Phase. Im zweiten Fall ist man entsprechend in der ungeordneten Phase. *Also ist* $T(0) = T^*$ *die Bedingung für den Phasenübergang* und $T_c = T^*$.

- Der repulsive Fixpunkt entspricht einem Phasentübergang.
- Die attraktiven Fixpunkte entsprechen den stabilen Phasen des Systems.

Wir wollen noch andeuten, wie man kritische Exponenten aus dieser Renormierungsgruppen-Beschreibung erhält. Wir müssen offenbar die Umgebung des Ising-Fixpunktes betrachten, $T = T^* + \delta T$. Hier gilt

$$\frac{d\delta T}{dl} = \frac{dT}{dl} \cong \left(-\epsilon + \frac{T^*}{J} \right) \delta T = \epsilon \delta T. \quad (7.89)$$

Dies läßt sich aufintegrieren:

$$\delta T(l) \cong \delta T(0) e^{\epsilon l} \quad (7.90)$$

oder in unserer alter Notation $t(l) \cong t(0) e^{\epsilon l}$. Die Skalierung der Korrelationslänge gehorcht, wie jede Länge, der Gleichung

$$\xi(l) = \xi(0) \underbrace{e^{-l}}_{=1/b}. \quad (7.91)$$

Andererseits ist nach Definition nahe am kritischen Punkt $\xi \sim |t|^{-\nu}$. Es folgt

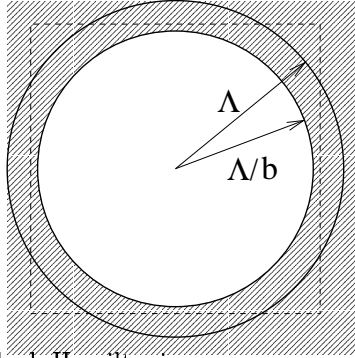
$$\frac{\xi(l)}{\xi(0)} = e^{-l} = \left(\frac{|t(l)|}{|t(0)|} \right)^{-\nu} = (e^{\epsilon l})^{-\nu} \quad (7.92)$$

$$\Rightarrow \nu = \frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{d-1}. \quad (7.93)$$

Für $d = 2$ kennen wir das exakte Ergebnis: $\nu = 1$, siehe 6.2, was mit dem Renormierungsgruppen-Ergebnis übereinstimmt. Für $d = 3$ ist der tatsächliche Exponent jedoch $\nu \approx 0.63$ anstatt $\nu = 0.5$.

7.4 Renormierungsgruppen-Flüsse beim Heisenberg-Modell

Das Heisenberg-Modell oder $O(3)$ -Vektormodell in d Dimensionen kann mit Hilfe der *Renormierung im Impulsraum*, siehe 7.2.4, behandelt werden. Die (komplizierte) Rechnung ist bei Chaikin und Lubensky angegeben. Wir benutzen hier nur das Resultat zur Diskussion typischer Eigenschaften der Renormierungsgruppe.



Wir betrachten den reduzierten Block-Hamiltonian

$$\frac{H}{k_B T} = \sum_{\mathbf{x}} \left(\frac{\tilde{\alpha}}{2} S^2 + \frac{\tilde{\beta}}{4} S^4 \right) + \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle} \frac{\tilde{\gamma}}{2a^2} [\mathbf{S}(\mathbf{x}) - \mathbf{S}(\mathbf{x}')]^2 \quad (7.94)$$

mit $\tilde{\alpha} = \alpha/k_B T$ usw. Es sei jetzt

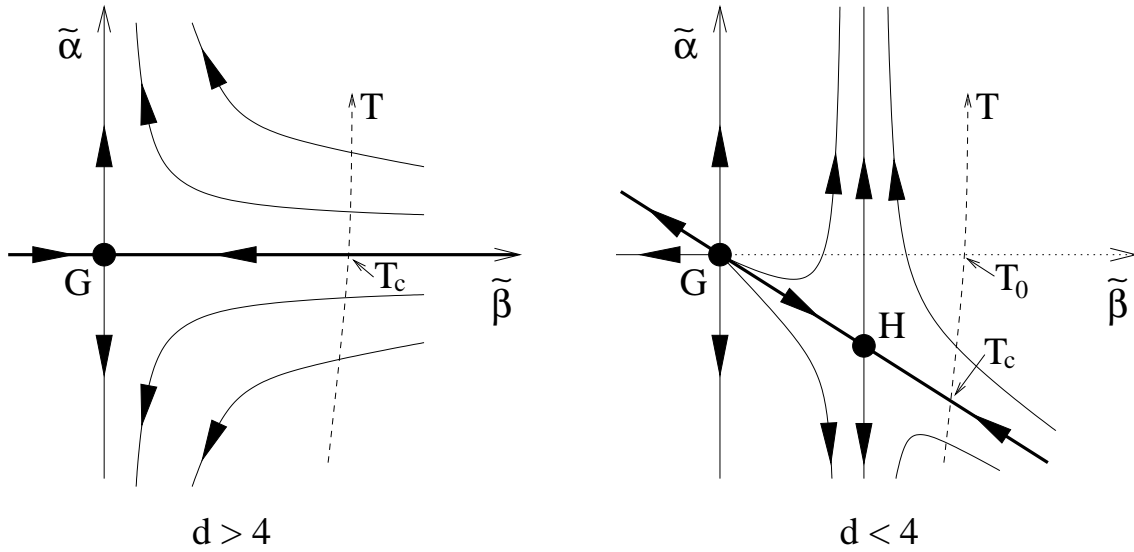
$$\epsilon = 4 - d. \quad (7.95)$$

Unter der Renormierungsgruppen-Transformation R_b mit $b = e^{\delta l}$, $\delta l \ll 1$, skalieren die Energie-Parameter $\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}$ und $\tilde{\gamma}$ sowie das Feld \mathbf{S} . Da \mathbf{S} nicht abhängig von den übrigen Parametern ist, hat man die Freiheit, einen Skalenexponenten zu wählen. Dies geschieht so, dass $d\tilde{\gamma}/dl = 0$ gilt ($\tilde{\gamma}$ ist invariant). Dann lauten die Rekursionsgleichungen

$$\frac{d\tilde{\alpha}}{dl} = 2\tilde{\alpha} + 5K_d \frac{\tilde{\beta}}{1 + \tilde{\alpha}} \quad (7.96)$$

$$\frac{d\tilde{\beta}}{dl} = \epsilon\tilde{\beta} - 11K_d \frac{\tilde{\beta}^2}{(1 + \tilde{\alpha})^2} \quad (7.97)$$

in linearer Ordnung in ϵ (K_d ist eine dimensionsabhängige Konstante). Sie entkoppeln von der Renormierung der Spins.



Renormierungsgruppen-Flüsse (Trajektorien der renormierten Parameter für variierendes l) für das d -dimensionale Heisenberg-Modell. Die gestrichelte Linie beschreibt jeweils die unrenormierten wahren Parameter für ein bestimmtes System als Funktion der Temperatur (oder einer anderen Größe).

Links: für $d > d_c = 4$ existiert nur ein *Gauß'scher Fixpunkt* G für endliche Parameter-Werte, nämlich $\tilde{\alpha} = 0, \tilde{\beta} = 0$. Für $\tilde{\alpha} > 0$ wird $\tilde{\alpha}(l)$ unter Renormierung beliebig groß \rightarrow Hochtemperatur-Phase. Für $\tilde{\alpha} < 0$ wird $\tilde{\alpha}(l)$ betragsmäßig beliebig groß und bleibt negativ \rightarrow Tieftemperatur-Phase. Der Phasenübergang findet also bei $\tilde{\alpha} = 0$ statt \rightarrow Gauß'sche Näherung gilt, siehe 4.2.6.

Rechts: für $d < d_c = 4$ existiert ein repulsiver Gauß'scher Fixpunkt G sowie ein *Heisenberg-Fixpunkt* H bei $\tilde{\alpha}^* < 0, \tilde{\beta}^* > 0$. Die beiden Phasen stimmen mit denen für $d > 4$ überein. Der Phasenübergang findet statt, wenn die Kurve der unrenormierten Parameter den *Attraktionsbereich* von H (dicke Gerade) schneidet. Es ist insbesondere $T_c < T_0$ (mean-field Übergangstemperatur).

Ein Phasenübergang findet statt, wenn die unrenormierten Parameter das Attraktionsbereich eines nicht in allen Richtungen attraktiven Fixpunktes schneiden.

Wie kann man das kritische Verhalten aus der Renormierungsgruppe ermitteln? Für $d < 4$ und kleines $\epsilon = 4 - d$ liegt der Heisenberg Fixpunkt ($d\tilde{\alpha}/dl = d\tilde{\beta}/dl = 0$) bei

$$\tilde{\alpha}^* = -\frac{5\epsilon}{22} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (7.98)$$

$$\tilde{\beta}^* = \frac{\epsilon}{11K_d} + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (7.99)$$

Linearisierung der Rekursionsgleichungen für $\delta\alpha := \tilde{\alpha} - \tilde{\alpha}^*$ und $\delta\beta := \tilde{\beta} - \tilde{\beta}^*$ ergibt

$$\begin{pmatrix} d\delta\alpha/dl \\ d\delta\beta/dl \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - 5\epsilon/11 & 5K_d/(1 + \tilde{\alpha}^*) \\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\alpha \\ \delta\beta \end{pmatrix}. \quad (7.100)$$

Diagonalisierung ergibt

$$\begin{array}{ll} \text{Eigenwert} & 2 - 5\epsilon/11 \quad \text{für Eigenvektor } (1, 0), \\ \text{Eigenwert} & -\epsilon \quad \text{für Eigenvektor entlang des Attraktionsbereiches.} \end{array} \quad (7.101)$$

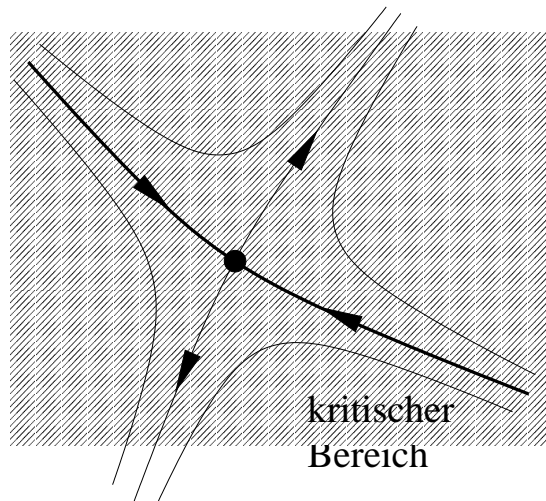
- wegen $\alpha \sim T - T_c \sim t$ skaliert $\tilde{\alpha}$ wie $t \rightarrow \lambda_t = 2 - 5\epsilon/11$
- $\lambda_t > 0$ für kleine $\epsilon \rightarrow$ Temperatur ist *relevant*
- der zweite Eigenwert ist $-\epsilon < 0 \rightarrow$ die entsprechende Linearkombination von $\tilde{\alpha}$ und $\tilde{\beta}$ ist *irrelevant*

Der Skalensexponent der Temperatur ist $\lambda_t = 1/\nu$ (wo $\xi \sim |t|^{-\nu}$), siehe 7.3.3. Also hier:

$$\nu = \frac{1}{2 - 5\epsilon/11}. \quad (7.102)$$

Für $d = 3$ erhält man $\nu = 1/(2 - 5/11) \cong 0.65$. Der tatsächliche Wert liegt bei $\nu \approx 0.71$. Allgemein:

- Fluß zum Fixpunkt hin \rightarrow negativer Skalensexponent \rightarrow irrelevantes Feld
- Fluß vom Fixpunkt fort \rightarrow positiver Skalensexponent \rightarrow relevantes Feld



Die Abbildung illustriert das folgende *wichtige Ergebnis*:

Liegen die unrenormierten Parameter *irgendwo* in der Nähe des Attraktionsbereiches eines Fixpunktes, der einen Phasenübergang beschreibt, so fließen die Parameter unter Renormierung i.A. zunächst zu diesem hin, dann aber von diesem fort *bestimmt durch die positiven Skalensexponenten des Fixpunktes*. Alle Systeme dieser Art zeigen *dasselbe* kritische Verhalten \rightarrow *dieselbe* Universalitätsklasse.

Liegen die Parameter weiter entfernt vom Attraktionsbereich, so zeigt die Renormierung typischerweise die Skalensexponenten des repulsiven Fixpunktes (im Beispiel des Gauß'schen), d.h. hier $\nu = 1/2$. Zwischen dem durch verschiedene Fixpunkte dominierten Verhalten besteht ein stetiger Übergang, also ein *crossover*.

Zusammenfassung:

- Attraktive Fixpunkte, oft im Unendlichen, beschreiben die stabilen Phasen des Systems.
- Teilweise attraktive Fixpunkte beschreiben, zusammen mit ihren Attraktionsbereichen, die kontinuierlichen Phasenübergänge. Das kritische Verhalten hängt nur von den Eigenschaften des Fixpunktes ab.
- Repulsive Fixpunkte bestimmen die Skaleneigenschaften weit entfernt von Phasenübergängen.

7.5 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Theorie

7.5.1 Einführung

Als letztes Beispiel für Renormierungsgruppen-Theorien betrachten wir die *Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-* (BKT-) *Theorie* für das zweidimensionale XY -Modell. Sie wurde erfolgreich auf zahlreiche Systeme angewandt:

System	Objekte der BKT-Theorie
dünne Filme aus superfluidem ^4He	Vortizes
zweidimensionales neutrales Plasma („Coulomb-Gas“)	geladene Teilchen
supraleitende dünne Filme (konventionelle und Kuprate)	Vortizes
einzelne Ebenen von Kuprat-Supraleitern	Vortizes
Josephson junction arrays	Vortizes
zweidimensionale Kristalle (Wigner-Kristall, Vortex-Gitter)	Versetzungen, Disklinationen
XY-Modell des Magnetismus in zwei Dimensionen	Vortizes
ferromagnetische dünne Filme mit leichter Ebene	Meronen
antiferromagnetische dünne Filme mit leichter Ebene	Meronen
u.a.	

Wir benutzen die für das XY-Modell angemessenen Begriffe. Die wesentliche Physik ist:

- Vortizes ($k = 1$) und Antivortizes ($k = -1$) werden thermisch paarweise erzeugt (mit $\Delta k = 0$)
- Vortizes und Antivortizes ziehen sich an und haben die Tendenz *gebundene Paare* zu bilden
- die Paare wechselwirken miteinander, kleine Paare werden im Feld großer Paare *polarisiert*
- die Polarisation führt zu einer teilweisen *Abschirmung* der Wechselwirkung großer Paare (ähnlich zur makroskopischen Elektrostatik)
- bei hinreichend hoher Temperatur, wenn viele Paare thermisch erzeugt werden, kann die Abschirmung für sehr große Paare *vollständig* werden und große *Paare brechen auf*
- die resultierenden freien Vortizes *zerstören* die *Ordnung*

Wir erinnern uns zunächst an das Verhalten des zweidimensionalen XY-Modells in der Gauß'schen Näherung, siehe 4.4.2. Der Ordnungsparameter sei

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \phi \begin{pmatrix} \cos \psi \\ \sin \psi \end{pmatrix}. \quad (7.103)$$

Das Modell zeigt für $T < T_0$ quasi-langreichweitige Ordnung, die Korrelationsfunktion des Ordnungsparameters ist

$$D_{ij}(\mathbf{x}) = \langle \phi_i(\mathbf{x}) \phi_j(0) \rangle \sim \delta_{ij} |\mathbf{x}|^{-k_B T / 2\pi \gamma \bar{\phi}^2} \equiv \delta_{ij} |\mathbf{x}|^{-k_B T / 2\pi \kappa}, \quad (7.104)$$

wobei $\bar{\phi}$ das Landau-Resultat für den Ordnungsparameter ist. $\kappa := \gamma \bar{\phi}^2$ ist die *Spinsteifigkeit*: für großes κ fällt die Korrelationsfunktion langsam ab \rightarrow die Ordnung ist *steif*. κ gibt auch an, wieviel Energie Spinwellen kosten: ihr Anteil an der Energie ist, in der Gauß'schen Näherung

$$E_\psi = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \kappa q^2 \psi^*(\mathbf{q}) \psi(\mathbf{q}), \quad (7.105)$$

siehe 4.4.1. Wir wollen nun die Effekte von Vortizes verstehen.

7.5.2 Kosterlitz-Renormierungsgruppe

Die Rekursionsgleichungen der BKT-Theorie lassen sich auf mehreren Wegen herleiten. Wir betrachten die Herleitung im formalen Rahmen der Renormierungsgruppen-Theorie (Kosterlitz 1974).

Die Vortizes haben nach 5.1.1 die Wechselwirkung

$$V(r) = -2\pi k_1 k_2 \kappa \ln \frac{r}{r_c} \quad (7.106)$$

und die Core-Energie E_c . k_1 , k_2 sind die Vortizitäten. Die großkanonische Zustandssumme der Vortizes ist

$$Z = \sum_N \frac{1}{(N!)^2} e^{-2N\beta E_c} \int_{D_1} \frac{d^2 r_1}{\tau^2} \dots \int_{D_{2N}} \frac{d^2 r_{2N}}{\tau^2} \exp \left(-\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j}^{2N} (-2\pi) k_i k_j \kappa \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{\tau} \right). \quad (7.107)$$

- N ist die Anzahl der Vortizes = Anzahl der Antivortizes

- $1/(N!)^2$ drückt Ununterscheidbarkeit aus
- $y := e^{-\beta E_c}$ ist die *Fugazität*
- die Integrationsgebiete D_i umfassen den gesamten zweidimensionalen Raum mit Ausnahme von Kreisscheiben des Radius τ zentriert um alle Vortizes (und Antivortizes) mit Nummern $j < i \rightarrow$ der minimale Abstand von Vortizes (und Antivortizes) ist τ
- $\tau \equiv r_c$

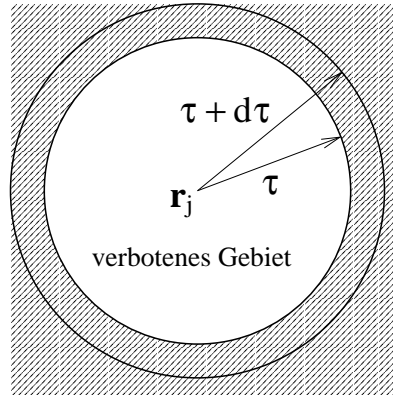
Programm der Renormierungsgruppen-Theorie von Kosterlitz:

1. führe die Integrale über $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ für das *kleinste Paar* näherungsweise aus,
2. renormiere die Parameter (hier y und κ) der übrigen Vortizes so, dass die Zustandssumme invariant bleibt,
3. reskaliere die Längenskala τ .

Eine wesentliche Annahme ist nun, dass das kleinste Paar aus einem Vortex und einem Antivortex besteht. Dies ist vernünftig, da sich diese anziehen, während sich gleichnamige Defekte abstoßen. Wir integrieren nun Paare der Größe $\tau \leq r < \tau + d\tau$ aus. Dies entspricht der folgenden *Aufteilung des Integrationsbereiches*:

$$\int_{D_1} d^2 r_1 \cdots \int_{D_{2N}} d^2 r_{2N} \cong \int_{D'_1} d^2 r_1 \cdots \int_{D'_{2N}} d^2 r_{2N} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \underbrace{\int_{D'_i} d^2 r_1 \cdots \int_{D'_{2N}} d^2 r_{2N}}_{\text{ohne } i \text{ und } j} \times \int_{\tilde{D}_j} d^2 r_j \int_{\tau \leq |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < \tau + d\tau} d^2 r_i \delta_{k_i, -k_j}. \quad (7.108)$$

Die D'_i entsprechen den D_i , aber mit einem Radius der Kreisscheiben von $\tau + d\tau$ anstatt τ . \tilde{D}_j ist die gesamte Fläche ohne Kreisscheiben des Radius τ um alle Vortizes $n \neq i, j$. Das letzte Integral umfaßt offensichtlich einen Kreisring um Vortex j mit Radien τ und $\tau + d\tau$. Das Kronecker- δ -Symbol $\delta_{k_i, -k_j}$ stellt sicher, dass das kleinste Paar ein Vortex-Antivortex-Paar ist. Beachte: dies ist noch eine weitere Methode der Dezimierung. Diese ist kontinuierlich, arbeitet aber im Ortsraum.



Wir wenden die Vorschrift nun auf die Zustandssumme Z an (nur die wesentlichen Zwischenergebnisse sind angegeben). Der von \mathbf{r}_i und \mathbf{r}_j abhängige Faktor im Integrand ergibt

$$\mathcal{I}_1 = \int_{\tau \leq |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < \tau + d\tau} d^2 r_i \exp \left(2\pi\beta \sum_{n \neq i, j} k_n k_j \kappa \ln \frac{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_i|}{\tau} - 2\pi\beta \sum_{n \neq i, j} k_n k_j \kappa \ln \frac{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_j|}{\tau} + 2\pi\beta \kappa \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{\tau} \right) \quad (7.109)$$

wobei wir $q_i = -q_j$ benutzt haben. Das Integral kann näherungsweise berechnet werden, wenn man berücksichtigt, dass $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \cong \tau$ und $|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_j| \gg \tau$ für fast alle n . Einführung von Polarkoordinaten und Entwicklung für kleine τ ergibt

$$\mathcal{I}_1 = 2\pi\tau d\tau \left(1 + \pi^2 \beta^2 \kappa^2 \sum_{m, n \neq i, j} k_m k_n \frac{(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_j) \tau^2}{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j|^2 |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_j|^2} \right). \quad (7.110)$$

Integration über \mathbf{r}_j ergibt

$$\int_{\tilde{D}_j} d^2 r_j \mathcal{I}_1 = 2\pi\tau d\tau \left(A + \pi^2 \beta^2 \kappa^2 \sum_{m,n \neq i,j} k_m k_n \tau^2 \int_{\tilde{D}_j} d^2 r_j \frac{(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j|^2 |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_j|^2} \right), \quad (7.111)$$

wobei A die Fläche des Systems ist ($A \rightarrow \infty$). Das verbliebene Integral ist

$$\int_{\tilde{D}_j} d^2 r_j \frac{(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_j|^2 |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_j|^2} = 2\pi \ln \frac{R}{\tau} - 2\pi(1 - \delta_{mn}) \ln \frac{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n|}{\tau}, \quad (7.112)$$

wobei R der typische Radius des Systems ist. Der Term mit R divergiert, verschwindet aber bei Ausführung der Summe $\sum_{m,n \neq i,j}$. Das Ergebnis ist

$$\int_{\tilde{D}_j} d^2 r_j \mathcal{I}_1 = 2\pi\tau d\tau \left(A - 2\pi^3 \beta^2 \kappa^2 \tau^2 \sum_{m \neq i,j} \sum_{n \neq i,j,m} k_m k_n \ln \frac{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n|}{\tau} \right). \quad (7.113)$$

Ausführung der Summe über i, j ergibt

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int_{\tilde{D}_j} d^2 r_j \mathcal{I}_1 = 2\pi\tau d\tau \left(N^2 A - 2\pi^3 \beta^2 \kappa^2 \tau^2 \sum_{m \neq n \text{ etc.}} (N-1)^2 k_m k_n \ln \frac{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n|}{\tau} \right), \quad (7.114)$$

wobei wir Terme der Ordnung N^0 vernachlässigt haben. Wenn dieses Ergebnis in die Vorschrift für die Zustandssumme eingesetzt wird, enthält diese nun zwei Terme: der erste entspricht der vollen Zustandssumme mit den D_i ersetzt durch D'_i und der zweite aufgrund der Renormierung lautet

$$\begin{aligned} & \sum_{N=1}^{\infty} \frac{1}{(N!)^2} \left(\frac{y}{\tau^2} \right)^{2N} \underbrace{\int_{D'_1} d^2 r_1 \cdots \int_{D'_{2N}} d^2 r_{2N}}_{2N-2 \text{ Integrale}} 2\pi\tau d\tau \left(N^2 A - 2\pi^3 \beta^2 \kappa^2 \tau^2 \right. \\ & \times \left. \sum_{m \neq n \text{ etc.}} (N-1)^2 k_m k_n \ln \frac{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n|}{\tau} \right) \exp \left(-\pi\beta \underbrace{\sum_{i \neq j} k_i k_j \kappa \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{\tau}}_{(2N-2)(2N-3) \text{ Summanden}} \right). \end{aligned} \quad (7.115)$$

Nun benennen wir in *diesem* Term N in $N+1$ um. Dann enthalten beide Terme in Z gerade $2N$ zweidimensionale Integrale. Wir schreiben alle Größen linear in $d\tau$ in den Exponenten mittels $1 + a d\tau \cong e^{a d\tau}$. Es folgt

$$\begin{aligned} Z' &= \exp \left[2\pi \left(\frac{y}{\tau^2} \right)^2 \tau d\tau A \right] \sum_N \frac{1}{(N!)^2} \left(\frac{y}{\tau^2} \right)^{2N} \int_{D'_1} d^2 r_1 \cdots \int_{D'_{2N}} d^2 r_{2N} \\ & \times \exp \left[-\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} \left(-2\pi\kappa + 8\pi^4 \beta y^2 \kappa^2 \frac{d\tau}{\tau} \right) k_i k_j \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{\tau} \right]. \end{aligned} \quad (7.116)$$

Nun folgt die Reskalierung, in der $\tau + d\tau$ durch τ' ersetzt wird, oder τ durch $\tau' - d\tau$. Dies ist nur in Termen relevant, die nicht bereits linear in $d\tau$ sind. Diese Terme sind zum einen

$$\frac{1}{\tau^2} = \frac{1}{(\tau' - d\tau)^2} \cong \frac{1 + 2 d\tau/\tau'}{(\tau')^2} \quad (7.117)$$

und zum anderen

$$\begin{aligned} & \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} (-2\pi\kappa) k_i k_j \ln \tau \right) = \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} (-2\pi\kappa) k_i k_j \ln(\tau' - d\tau) \right) \\ & \cong \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} (-2\pi\kappa) k_i k_j \ln \tau' \right) \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} (-2\pi\kappa) k_i k_j \left[-\frac{d\tau}{\tau'} \right] \right) \\ & \cong \exp \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} (-2\pi\kappa) k_i k_j \ln \tau' \right) \left(1 - \pi\beta\kappa \frac{d\tau}{\tau'} \right)^{2N}. \end{aligned} \quad (7.118)$$

Einsetzen in die Zustandssumme ergibt schließlich

$$Z' = \exp \left[2\pi \left(\frac{y}{(\tau')^2} \right)^2 \tau' d\tau A \right] \sum_N \frac{1}{(N!)^2} \left(\frac{y}{(\tau')^2} \right)^{2N} \left[1 + (2 - \pi\beta\kappa) \frac{d\tau}{\tau'} \right]^{2N} \\ \times \int_{D'_1} d^2r_1 \cdots \int_{D'_{2N}} d^2r_{2N} \exp \left[-\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} \left(-2\pi\kappa + 8\pi^4 \beta y^2 \kappa^2 \frac{d\tau}{\tau'} \right) k_i k_j \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{\tau'} \right]. \quad (7.119)$$

Wir diskutieren jetzt die renormierte Zustandssumme: Z' enthält den Faktor

$$Z_0 = \exp \left[2\pi \left(\frac{y}{\tau^2} \right)^2 \tau d\tau A \right], \quad (7.120)$$

der die Zustandssumme des ausintegrierten Paares darstellt. Er ist irrelevant für die Renormierung von κ und y . Die Zustandssumme Z' ist ansonsten identisch mit Z , wenn wir setzen

$$y(\tau') = \left[1 + (2 - \pi\beta\kappa) \frac{d\tau}{\tau'} \right] y(\tau) \quad (7.121)$$

$$\kappa(\tau') = \kappa(\tau) - 4\pi^3 \beta y^2 \kappa^2(\tau) \frac{d\tau}{\tau'}. \quad (7.122)$$

Mit der *logarithmischen Längenskala*

$$l := \ln \frac{\tau}{r_c}, \quad dl = \frac{d\tau}{\tau}, \quad (7.123)$$

und der üblichen Definition der *reduzierten Steifigkeit*

$$K := \beta\kappa \quad (7.124)$$

lassen sich die Renormierungen auch schreiben als

$$\frac{dy}{dl} = (2 - \pi K) y \quad (7.125)$$

$$\frac{dK}{dl} = -4\pi^3 y^2 K^2. \quad (7.126)$$

Dies sind die *Kosterlitz-Rekursionsgleichungen* der BKT-Theorie. Sie unterliegen den Anfangsbedingungen

$$y(l=0) = e^{-\beta E_c} \quad \text{und} \quad K(l=0) = \frac{\gamma \phi^{-2}}{k_B T}. \quad (7.127)$$

7.5.3 Ergebnisse der BKT-Theorie

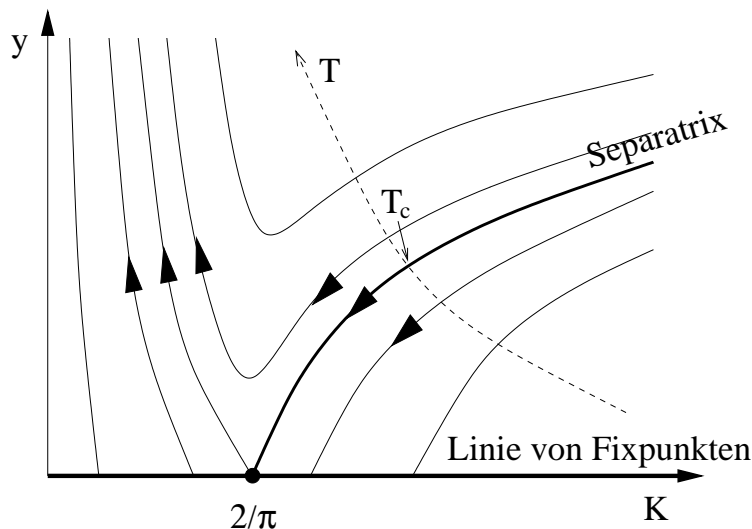
Nun wollen wir die Kosterlitz-Rekursionsgleichungen auswerten. Man sieht leicht, dass

$$\frac{dC}{dl} = 0 \quad \text{für} \quad C = 2\pi^2 y^2 - \frac{2}{\pi K} - \ln K. \quad (7.128)$$

C ist also invariant unter Renormierung, d.h. eine *Erhaltungsgröße* oder ein *Integral* des Differentialgleichungs-Systems. Es folgt

$$2\pi y^2 = 2\pi y_0^2 + \frac{2}{\pi} \left(\frac{1}{K} - \frac{1}{K_0} \right) + \ln \frac{K}{K_0}, \quad (7.129)$$

wobei y_0 und K_0 die unrenormierten Parameter sind. Diese Gleichung gibt die exakten Renormierungsgruppen-Flüsse an.



Renormierungsgruppen-Flüsse der BKT-Theorie. K ist die reduzierte Steifigkeit, die den Widerstand des Systems gegen Drehungen der Spins beschreibt, und auch die Stärke der Vortex-Antivortex-Wechselwirkung. y ist die Fugazität, die die Wahrscheinlichkeit der thermischen Erzeugung von Vortizes angibt. Die renormierten Parameter lassen sich als Wechselwirkungsstärke bzw. Fugazität von Paaren der Größe $\tau = r_c e^l$ interpretieren (genauer ist y^2 die Paar-Fugazität). Die gestrichelte Linie beschreibt die unrenormierten Parameter für ein spezielles System. Wir diskutieren nun die Hoch- und die Tieftemperaturphase:

(a) Die *Hochtemperaturphase* wird durch den Fixpunkt $y^* = \infty$, $K^* = 0$ charakterisiert. Alle Startwerte oberhalb der *Separatrix* (= Attraktionsbereich des Fixpunktes $y^* = 0$, $K^* = 2/\pi$) fließen zum Hochtemperatur-Fixpunkt. Der Schnittpunkt der Kurve der unrenormierten Parameter und der Separatrix definiert die Übergangstemperatur T_c .

- $y \rightarrow \infty$: große Paare sind häufig
- $K \rightarrow 0$: die Wechselwirkung großer Paare ist vollständig *abgeschirmt* \rightarrow freie Vortizes

Formal *divergiert* die Vortexdichte, was im Widerspruch zur Annahme eines minimalen Abstandes r_c steht. Man benötigt einen Abschneideparameter ξ_+ oder höhere Terme in den Rekursionsgleichungen. Mit Hilfe höherer Terme lassen sich die folgenden Aussagen rigoros beweisen. Man wählt als *ad hoc* Kriterium für den Abschneideparameter z.B.

$$y(\xi_+) = 1, \quad (7.130)$$

da für $y > 1$ die renormierte Core-Energie negativ wäre, was unphysikalisch ist. Paare der Größe $r \geq \xi_+$ werden als freie Vortizes angesehen. Ihre Dichte ist offenbar

$$n_{\text{fr}} \sim 1/\xi_+^2, \quad (7.131)$$

da ξ_+ für die freien Vortizes die einzige Längenskala ist. ξ_+ läßt sich aus den Rekursionsgleichungen ermitteln: für $t = (T - T_c)/T_c \ll 1$ ist

$$\xi_+ \cong r_c \exp\left(bt^{-1/2}\right) \quad \Rightarrow \quad n_{\text{fr}} \sim \frac{1}{r_c^2} \exp\left(-2bt^{-1/2}\right), \quad (7.132)$$

wobei b eine nicht universelle Konstante ist. Für $T < T_c$ erwarten wir natürlich $n_{\text{fr}} = 0$. Es ist offensichtlich, dass freie Vortizes die magnetische Ordnung stark stören. Da die freien Vortizes unkorreliert sind, kann sich an der Stelle eines Vortex ebensogut ein Antivortex befinden. Die Korrelationsfunktion der Spins ist also kurzreichweitig mit der Korrelationslänge $\xi \approx \xi_+$. Da ξ für $T \rightarrow T_c^+$ *exponentiell* divergiert, ist der kritische Exponent

$$\nu = \infty. \quad (7.133)$$

Wir betrachten noch die *freie Energiedichte* $f(T)$. Wir zerlegen f in einen Anteil f_p von den gebundenen Paaren ($\tau < \xi_+$) und einen Anteil f_{fr} von den freien Vortizes ($\tau \geq \xi_+$). Da K und y für gegebene Paargröße τ *glatte* Funktionen der Temperatur sind, sollte f_p ebenfalls *glatt* in T ist.

Der Anteil f_{fr} für *freie* Vortizes muss andererseits proportional zu n_{fr} sein, das zwar eine essentielle Singularität bei $T = T_c$ hat, aber beliebig oft differenzierbar ist. Speziell folgt, dass der kritische Exponent der spezifischen Wärme

$$\alpha = 0 \quad (7.134)$$

ist und allgemein:

Der Phasenübergang des zweidimensionalen XY -Modells (*BKT-Übergang*) ist von der Ordnung unendlich, da alle Ableitungen der freien Energie nach ihrer natürlichen Variablen T stetig sind.

(b) Die *Tieftemperaturphase* ist durch eine *Linie von Fixpunkten* $y^* = 0$, $K^* \geq 2/\pi$ charakterisiert. Alle Startwerte auf oder unterhalb der Separatrix fließen zu dieser Linie.

- $y \rightarrow 0$: große Paare sind beliebig selten
- $K \rightarrow K(\infty) \equiv K_R \geq 2/\pi$, $K_R < K(r_c) \equiv K_0$: die Steifigkeit wird durch Renormierung kleiner, bleibt aber endlich – abgeschwächte, aber logarithmische Wechselwirkung großer Paare (kosten beliebig viel Energie)

Da jede Temperatur zu einem anderen Fixpunkt gehört, entspricht jeder Temperatur $T \leq T_c$ eigentlich eine eigene Phase. Das System ist für alle $T \leq T_c$ *kritisch*. Insbesondere erwartet man *temperaturabhängige kritische Exponenten*. Beachte auch, dass für kleine Abweichungen δK von K_R gilt $d\delta K/dl = 0 \Rightarrow \delta K = \text{const} \sim e^{\lambda_K l}$ mit $\lambda_K = 0$. K ist also *marginal*. Allgemein treten marginale Felder auf, wenn Fixpunkte (nicht nulldimensionale) Mannigfaltigkeiten bilden.

Die renormierte Steifigkeit K_R für $T \rightarrow T_c^-$ kann aus der Invarianten C ermittelt werden. Man stellt zunächst fest, dass $C(T_c) = -1 - \ln(2/\pi)$ und $C \cong C(T_c) + C't$ für $|t| \ll 1$. Mit $y \rightarrow 0$ folgt

$$C't \cong C - C(T_c) = -\frac{2}{\pi K_R} - \ln K_R + 1 + \ln \frac{2}{\pi} \cong -\frac{\pi^2}{8} \left(K_R - \frac{2}{\pi} \right)^2, \quad (7.135)$$

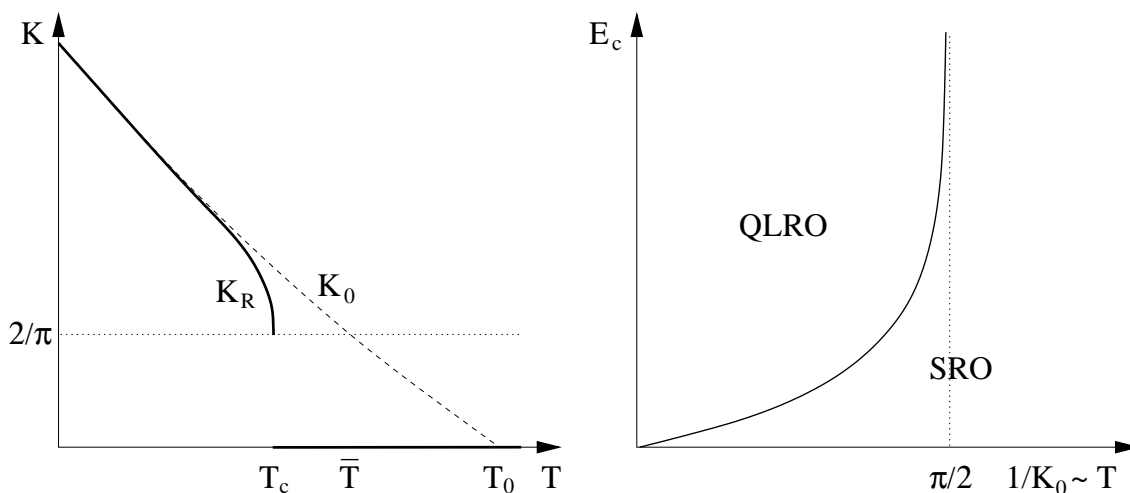
wo wir die rechte Seite nach $K_R - 2/\pi = K_R - K_R(T_c)$ entwickelt haben. Es folgt

$$K_R \cong \frac{2}{\pi} + \sqrt{B|t|} \quad (7.136)$$

mit einer nicht universellen Konstante B . Für $T > T_c$ ist $K_R = 0$. Allgemein ist $K_R < K(r_c) = K_0$ und die unrenormierte Steifigkeit $K_0 = \gamma \bar{\phi}^2 / k_B T$ ist

$$K_0 \sim T_0 - T \quad (7.137)$$

für $T \approx T_0 > T_c$. Insgesamt ergibt sich folgendes Bild:



Links: Die renormierte Steifigkeit K_R gemäß der BKT-Theorie (dicke Kurve) sowie die unrenormierte Steifigkeit K_0 (gestrichelte Kurve). Rechts: Phasendiagramm gemäß der BKT-Theorie.

K_R zeigt bei T_c einen Sprung vom *universellen* Wert $2/\pi$ auf Null. Dieser Wert ist entscheidend für den experimentellen Nachweis eines BKT-Überganges. Da $K_R < K_0$, ergibt $K_0(\bar{T}) = 2/\pi$ eine

obere Schranke für die Übergangstemperatur. Da $K_0 \sim T_0 - T$ ist $T_0 - \bar{T}$ und damit $T_0 - T_c$ i.A. nicht klein gegenüber T_0 .

Nach der Definition eines Ordnungsparameters in 2.2 kann man sagen, dass K_R der *Ordnungsparameter der BKT-Theorie* ist. K_R ist jedoch *keine Ableitung der freien Energie*, da diese ja alle stetig sind.

Nun werden die Vortex-Antivortex-Paare auch von *Spinwellen* polarisiert und verringern daher deren Energie (Steifigkeit). Man nimmt an, dass die renormierte Steifigkeit $K(\tau)$, die aus der Vortex-Wechselwirkung berechnet wurde, auch für Spinwellen der Wellenlänge $\lambda = \tau$ gilt. Entsprechend nimmt man für die Korrelationsfunktion für $T < T_c$ das Ergebnis der Gauß'schen Näherung aus 4.4.2 und ersetzt für große Längenskalen $K = \gamma \bar{\phi}^2 / k_B T$ durch $K_R = K(\tau \rightarrow \infty)$:

$$\mathcal{D}_{ij;\text{Gauß}}(\mathbf{x}) \sim \delta_{ij} |\mathbf{x}|^{-k_B T / 2\pi \gamma \bar{\phi}^2} = |\mathbf{x}|^{-1/2\pi K_0} \quad (7.138)$$

$$\mathcal{D}_{ij;\text{BKT}}(\mathbf{x}) \sim \delta_{ij} |\mathbf{x}|^{-1/2\pi K_R} \equiv \delta_{ij} |\mathbf{x}|^{-\eta} \quad (7.139)$$

$$\Rightarrow \quad \eta = \frac{1}{2\pi K_R}. \quad (7.140)$$

Wir sehen, dass der Exponent η temperaturabhängig ist, wie oben vermutet. Speziell gilt

$$\eta(T_c) = \frac{1}{4} \quad (7.141)$$

und $0 < \eta(T) < 1/4$ für $T < T_c$. Für $T_c < T < T_0$ ist $\eta = \infty \rightarrow$ Korrelationen fallen schneller ab als jedes Potenzgesetz, in Übereinstimmung mit dem obigen Argument für kurzreichweitige Ordnung.

Die BKT-Theorie läßt sich experimentell z.B. an supraleitenden Filmen überprüfen, für die nämlich die Spannung V und der Strom I gemäß $V \sim I^{1+1/(2\eta)} = I^{1+\pi K}$ zusammenhängen. Die BKT-Theorie wird i.A. gut bestätigt. Insbesondere gilt genau am Übergang $\eta = 1/4$, also $V \sim I^3$. Für $T < T_c$ ist der Exponent größer und für $T > T_c$ ist $V \sim I^1$, d.h. man findet Ohm'sches Verhalten.

Weiter ist der Vergleich mit dem *6-Vertex-F-Modell* möglich, das vermutlich zu derselben Universalitätsklasse wie das zweidimensionale *XY-Modell* gehört. Die Ergebnisse bezüglich des kritischen Verhaltens stimmen überein \rightarrow BKT-Theorie gilt hinreichend nahe bei T_c wahrscheinlich *exakt*.

Anhang A

Aufgaben

A.1 Kritische Exponenten eines zweidimensionalen Ferromagneten

Die Magnetisierung von zweidimensionalen, isotropen Ferromagneten hängt in komplizierter Weise von Temperatur und Magnetfeld ab. Als einfaches Modell hierfür betrachten wir folgende Zustandsgleichung:

$$\frac{m}{m_0} = 1 - \exp\left(-b\frac{H}{T}\right) \quad (\text{A.1})$$

mit einer Konstanten b . Skizziere das Phasendiagramm. Berechne die isotherme Suszeptibilität

$$\chi_T = \left(\frac{\partial m}{\partial H}\right)_T \quad (\text{A.2})$$

und bestimme die kritischen Exponenten γ und δ .

Lösung: Der normale kritische Punkt des Ferromagneten ist nach $T_c = 0$, $H_c = 0$ verschoben. Dass es sich tatsächlich um einen kritischen Punkt handelt sieht man z.B. an der Suszeptibilität

$$\chi_T = \frac{b}{T} \exp\left(-b\frac{H}{T}\right) = \frac{b}{T} \quad \text{für } H = 0, T > 0. \quad (\text{A.3})$$

Demnach ist $\gamma = 1$. Die Magnetisierung für $T = 0$ und $H > 0$ ist

$$m = m_0 \sim H^0 = H^{1/\delta}, \quad (\text{A.4})$$

also $\delta = \infty$.

A.2 Konstruktion von Landau-Theorien

A.2.1 Anisotroper Ferromagnet

Wir betrachten einen kubischen Ferromagneten. Aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung spüren die Spins die räumliche Symmetrie, oder genauer den Mangel derselben.

(a) Wie lautet das thermodynamische Potential bis zur vierten Ordnung in der Magnetisierung \mathbf{M} für diesen Fall? Was ändert sich für einen tetragonalen Kristall? Für eine Monolage mit Quadratgitter?

(b) Wie groß ist jeweils die Entartung des Gleichgewichtszustands? Diskutiere auch die Richtung von \mathbf{M} für nicht verschwindendes äußeres Feld \mathbf{H} .

A.2.2 Superfluides ^4He

In einem nicht wechselwirkenden Bose-Gas mit $T < T_c$ befindet sich ein makroskopischer Anteil der Teilchen im Grundzustand, die übrigen besetzen angeregte Zustände. Analog kann man ein *Zwei-Flüssigkeits-Modell* für ^4He aufstellen, das ein stark wechselwirkendes Bose-Gas ist. Dabei geht man

davon aus, dass sich ein Teil der Heliumatome in demselben Quantenzustand befindet, dem *Kondensat*, das durch eine komplexe Einteilchen-Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ beschrieben wird. Experimentell findet man, dass ψ im Gleichgewicht räumlich konstant ist. Oberhalb des λ -Übergangs ist $\psi = 0$, darunter ist $\psi \neq 0$. Demnach ist ψ ein geeigneter Ordnungsparameter.

(a) Gib die freie Enthalpie G von ^4He in der Nähe des Phasenübergangs bis zur vierten Ordnung in ψ an. Beachte, dass in der Quantenmechanik die *globale* Phase einer Wellenfunktion unbeobachtbar ist.

(b) Diskutiere den Gleichgewichtszustand für $T > T_c$ und $T < T_c$ sowie das Verhalten des Systems gegenüber langwelligten Störungen des Ordnungsparameters.

(c) Betrachte die Dichte ρ_n der „normalen“ Atome, die sich nicht im Kondensat befinden, als sekundären Ordnungsparameter. Gib G unter Einschluß von ρ_n an und bestimme $\rho_n(T)$ nahe des Phasenübergangs. Zeige, dass sich die Symmetrie von G dadurch nicht ändert (Hinweis: drücke ρ_n im Gleichgewicht durch ψ aus). Bestimme den Beitrag von ρ_n zur spezifischen Wärme.

A.2.3 Uniaxialer Ferromagnet mit Übergang erster Ordnung

Betrachte einen uniaxialen Ferromagneten mit der freien Energie

$$F(T, M) = \frac{a}{2}(T - T_0) M^2 + \frac{\beta}{4} M^4 + \frac{\gamma}{6} M^6 \quad (\text{A.5})$$

($a > 0, \beta < 0, \gamma > 0$). Die freie Enthalpie im Feld ist dann

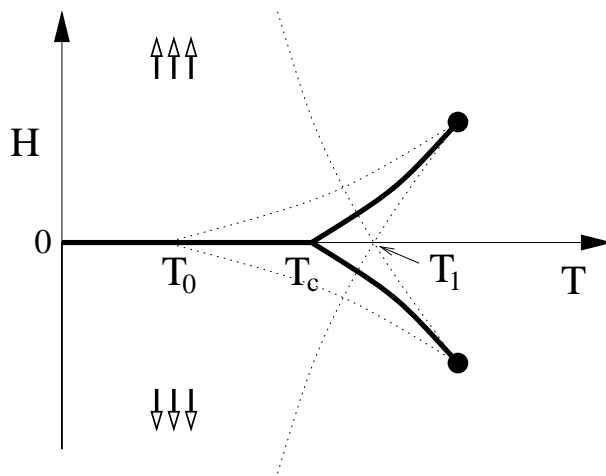
$$G(T, H) = \frac{a}{2}(T - T_0) M^2 + \frac{\beta}{4} M^4 + \frac{\gamma}{6} M^6 - HM. \quad (\text{A.6})$$

(a) Skizziere und Diskutiere das Phasendiagramm im Raum (T, H) unter Einschluß der Koexistenzgebiete. Hinweis: betrachte zunächst das Phasendiagramm für den „normalen“ Fall $\beta > 0, \gamma \geq 0$.

(b) Berechne die Entropie $S(T)$ bei $H = 0$. Was sagt das Ergebnis über die Ordnung des Phasenübergangs?

(c) Berechne die Suszeptibilität $\chi_T(T)$ und die spezifischen Wärme $C_H(T)$ bei $H = 0$ in der Nähe des Phasenübergangs. Ist es möglich und sinnvoll, für dieses Modell kritische Exponenten zu definieren?

Lösung: (a) Für das angegebene Potential G :



Die Punkte entsprechen kritischen Punkten. „Schmetterlings-Katastrophe“ in der Sprache der Katastrophen-Theorie.

(b) Zu lösen:

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{\partial F}{\partial M} \right)_T \\ &= a(T - T_0) M + \beta M^3 + \gamma M^5 \\ \Rightarrow 0 &= a(T - T_0) + \beta M^2 + \gamma M^4 \quad \text{oder} \quad M = 0 \\ \Rightarrow M^2 &= \frac{-\beta + \sqrt{\beta^2 - 4\gamma a(T - T_0)}}{2\gamma} \quad \text{oder} \quad M = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

(nur Zeichen „+“ entspricht einem Minimum). M springt bei T_c von der trivialen Lösung auf eine endliche Lösung.

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_M = -\frac{a}{2} M^2. \quad (\text{A.8})$$

Die Entropie hat ebenfalls einen Sprung bei T_c um $\Delta S = aM^2(T_c)/2$. Der Übergang ist erster Ordnung. Die latente Wärme ist

$$\Delta Q = T_c \Delta S = \frac{a}{2} T_c M^2(T_c). \quad (\text{A.9})$$

(c) Suszeptibilität: die Magnetisierung für kleine H ist $M = M(H=0) + \chi_T H \equiv M_0 + \chi_T H$. Daher:

$$\begin{aligned} 0 &= a(T - T_0) M + \beta M^3 + \gamma M^5 - H \\ &\cong a(T - T_0) M_0 + \beta M_0^3 + \gamma M_0^5 + a(T - T_0) \chi_T H + 3\beta M_0^2 \chi_T H + 5\gamma M_0^4 \chi_T H \\ &\quad - H + \mathcal{O}(H^2) \\ \Rightarrow \chi_T &= \frac{1}{a(T - T_0) + 3\beta M_0^2 + 5\gamma M_0^4}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

- für $T < T_c$ ist $M_0(T) \neq 0$; es tritt kein Pol auf, da $a(T - T_0) + 3\beta M_0^2 + 5\gamma M_0^4 > a(T - T_0) + \beta M_0^2 + \gamma M_0^4 = 0$
- für $T > T_c$ ist $M_0(T) = 0$, also $\chi_T = [a(T - T_0)]^{-1} \rightarrow$ scheinbar normales kritisches (Curie-) Verhalten mit Übergang bei T_0 (nicht T_c !) und Exponent $\gamma = 1$
- bei $T = T_c$ macht χ_T einen Sprung – man könnte Exponenten definieren, hier $\gamma = \gamma' = 0$

Allgemein kann einem Übergang erster Ordnung nichttriviales kritisches Verhalten überlagert sein, Exponenten enthalten dann durchaus Information.

Spezifische Wärme: Zu berechnen ist

$$\begin{aligned} C_H &= T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H \\ &= -T \frac{a}{2} \left(\frac{\partial M_0^2}{\partial T} \right)_H \\ &= -T \frac{a}{8\gamma} \frac{-4\gamma a}{\sqrt{\beta^2 - 4\gamma a(T - T_0)}} \\ &= T \frac{a^2}{2\sqrt{\beta^2 - 4\gamma a(T - T_0)}} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

für $T < T_c$. Für $T > T_c$ ist $C_H = 0$. Bei $T = T_c$ ist die erste Lösung stetig und nicht Null \rightarrow Sprung in C_H , $\beta = \beta' = 0$.

A.2.4 Landau-Theorie am trikritischen Punkt

Wir gehen vom ferroelektrischen Modell

$$G = \tilde{G} + \frac{a}{2}(T - T_0)p_z^2 + \frac{\beta}{4}p_z^4 + \frac{\gamma}{6}p_z^6 \quad (\text{A.12})$$

($\gamma > 0$) aus. Es hat einen trikritischen Punkt bei $\beta = 0$. Bestimme die kritischen Exponenten β und δ an diesem Punkt, vergleiche mit den normalen Ergebnissen der Landau-Theorie ($\beta = 1/2$, $\delta = 3$). Zur Erinnerung: $p_z^0 \sim (T_c - T)^\beta$, $E_z \sim (p_z^0)^\delta$.

A.3 BCS-Theorie der Supraleitung

(a) Zeige, dass die Quasiteilchen, die man aus der Bogoliubov-Valatin-Transformation

$$\psi_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (\text{A.13})$$

$$\psi_{-\mathbf{k}\downarrow} = u_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \quad (\text{A.14})$$

erhält, der Fermi-Statistik gehorchen.

(b) Die BCS-Theorie ergibt (für s -Wellen-Symmetrie von Δ) die Gap-Gleichung

$$\Delta = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} U \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \quad (\text{A.15})$$

mit $E_{\mathbf{k}} = ([2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - \mu]^2 + \Delta^2)^{1/2}$. Da die Quasiteilchen eine Superposition von Elektronen und Löchern darstellen, ist die Teilchenzahl im BCS-Grundzustand nicht scharf. Wie kann man die BCS-Theorie bei konstanter Teilchenzahl N formulieren?

Lösung: (a) Berechne einfach den Antikommutator: Löcher und Quasiteilchen sind auch Fermionen. Anmerkung: Bosonen-, „Löcher“ sind *keine* Bosonen.

(b) Wähle das chemische Potential μ so, dass $\langle N \rangle = N$ (vorgegeben) gilt. Es ergibt sich eine zweite Gleichung, die simultan mit der Gap-Gleichung erfüllt sein muss:

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \left(\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle \right) = \sum_{\mathbf{k}} \left[(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \langle \psi_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \langle \psi_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \psi_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle + 2v_{\mathbf{k}}^2 \right]. \quad (\text{A.16})$$

Terme mit $\psi^\dagger \psi^\dagger$ und $\psi \psi$ fallen weg, da Eigenzustände zu H_{mf} eine wohldefinierte Quasiteilchenzahl haben ($\psi^\dagger \psi$ vertauscht mit H_{mf}). Also muss gelten:

$$N = 2 \sum_{\mathbf{k}} [(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) f(E_{\mathbf{k}}) + v_{\mathbf{k}}^2] = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} [2f(E_{\mathbf{k}}) - 1] + \sum_{\mathbf{k}} 1 = \mathcal{N} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} [1 - 2f(E_{\mathbf{k}})]. \quad (\text{A.17})$$

Aus dieser Gleichung und der Gap-Gleichung lassen sich im Prinzip die beiden Unbekannten Δ und μ bestimmen. (Für den Normalleiter ergibt sich $N = 2 \sum_{\mathbf{k}} f(\epsilon_{\mathbf{k}})$.)

A.4 Landau-Theorie mit inhomogenem Ordnungsparameter

A.4.1 Gradientenentwicklung

Wir wollen uns überzeugen, dass die in der Gradientenentwicklung vernachlässigten Terme höherer Ordnung die Ergebnisse nicht verändern. Wir gehen von der freien Energie

$$F[T, \phi(\mathbf{x})] = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} \phi^2(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{4} \phi^4(\mathbf{x}) + \frac{\gamma}{2} \nabla \phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi(\mathbf{x}) + \dots \right] \quad (\text{A.18})$$

aus. Berechne und diskutiere jeweils die inverse Suszeptibilität $\chi^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ im verschwindenden äußeren Feld sowie die Fourier-transformierte Suszeptibilität $\chi(\mathbf{q})$, wenn folgende symmetrie-erlaubte Terme zum Integranden von F hinzugefügt werden:

- (a) $\frac{\gamma'}{2} \phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla^2 \phi(\mathbf{x})$
- (b) $\frac{\delta}{2} \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) \nabla^2 \phi(\mathbf{x})$
- (c) $\frac{\epsilon}{2} \phi^2(\mathbf{x}) \nabla \phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi(\mathbf{x})$

Lösung: (a) Hat nach partieller Integration dieselbe Form wie der γ -Term, also ergibt sich nur eine Verschiebung von γ .

(b) Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \chi^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{\delta^2 F}{\delta \phi(\mathbf{x}) \delta \phi(\mathbf{x}')} \\ &= \frac{\delta}{\delta \phi(\mathbf{x})} (\alpha \phi(\mathbf{x}') + \beta \phi^3(\mathbf{x}') + \gamma \nabla \phi(\mathbf{x}') \cdot \nabla + \delta \nabla^2 \phi(\mathbf{x}') \nabla^2) \\ &= \frac{\delta}{\delta \phi(\mathbf{x})} (\alpha \phi(\mathbf{x}') + \beta \phi^3(\mathbf{x}') - \gamma \nabla^2 \phi(\mathbf{x}') + \delta \nabla^4 \phi(\mathbf{x}')) \\ &= (\alpha + 3\beta \phi^2(\mathbf{x}) - \gamma \nabla^2 + \delta \nabla^4) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Fourier-Transformation ergibt ($\nabla \rightarrow i\mathbf{q}$) im Null-Feld

$$\chi(\mathbf{q}) = \frac{1}{\alpha + 3\beta\phi^2 + \gamma q^2 + \delta q^4}. \quad (\text{A.20})$$

Für kleine \mathbf{q} ist der neue Term vernachlässigbar. Für größere \mathbf{q} fällt χ schneller ab. Als Faustregel bestimmen bei der Fourier-Transformation die kleinen \mathbf{q} das Verhalten bei großen Längenskalen. Also ändert sich hier nichts, es sei denn $\gamma = 0$.

(c) Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \chi^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{\delta}{\delta\phi(\mathbf{x})} \left(\alpha\phi(\mathbf{x}') + \beta\phi^3(\mathbf{x}') + \gamma\nabla\phi(\mathbf{x}') \cdot \nabla \right. \\ &\quad \left. + \epsilon [\phi(\mathbf{x}') \nabla\phi(\mathbf{x}') \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}') + \phi^2(\mathbf{x}') \nabla\phi(\mathbf{x}') \cdot \nabla] \right) \\ &= \frac{\delta}{\delta\phi(\mathbf{x})} \left(\alpha\phi(\mathbf{x}') + \beta\phi^3(\mathbf{x}') - \gamma\nabla^2\phi(\mathbf{x}') \right. \\ &\quad \left. + \epsilon [\underbrace{\phi(\mathbf{x}') \nabla\phi(\mathbf{x}') \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}') - 2\phi(\mathbf{x}') \nabla\phi(\mathbf{x}') \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}') - \phi^2(\mathbf{x}') \nabla^2\phi(\mathbf{x}')}_{\text{...}}] \right) \\ &= \left(\alpha + 3\beta\phi^2(\mathbf{x}) - \gamma\nabla^2 + \epsilon [-\nabla\phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla\phi(\mathbf{x}) - 2\phi(\mathbf{x}) \nabla\phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla - 2\phi(\mathbf{x}) \nabla^2\phi(\mathbf{x}) \right. \\ &\quad \left. - \phi^2(\mathbf{x}) \nabla^2] \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Nun ist im Gleichgewicht $\phi = \text{const}$, $\nabla\phi = 0$, also

$$\chi^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = (\alpha + 3\beta\phi^2 - \gamma\nabla^2 - \epsilon\phi^2 \nabla^2) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.22})$$

wie man schon raten konnte. γ wird also durch $\gamma + \epsilon\phi^2 = \gamma - \epsilon\alpha/\beta$ ersetzt. Solange $\gamma > 0$ und $|\epsilon|$ nicht zu groß ist, ergibt sich nichts qualitativ neues. Nur für betragsmäßig großes, negatives ϵ bricht die Theorie schließlich zusammen.

A.4.2 Ginzburg-Kriterium am trikritischen Punkt

Betrachte das durch die freie Energie

$$F = \int d^d x \left[\frac{\alpha}{2} \phi^2 + \frac{g}{6} \phi^6 + \frac{\gamma}{2} \nabla\phi \cdot \nabla\phi \right] \quad (\text{A.23})$$

beschriebene ϕ^6 -Modell. Die Landau-Theorie sagt voraus, dass der Phasenübergang bei $\alpha = 0$ an einem trikritischen Punkt erfolgt. Bestimme die obere kritische Dimension d_c für dieses Modell.

Lösung: Zunächst berechnen wir die Korrelationsfunktion:

$$\chi^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = (\alpha + 5g\phi^4 - \gamma\nabla^2) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.24})$$

also

$$\chi(\mathbf{q}) = \beta\mathcal{G}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\alpha + 5g\phi^4 + \gamma q^2}. \quad (\text{A.25})$$

Der Gleichgewichtswert von ϕ ergibt sich durch Minimierung von F zu $\langle\phi\rangle = (-\alpha/g)^{1/4}$, also ist für $T < T_c$:

$$\beta\mathcal{G}(\mathbf{q}) = \frac{1}{-4\alpha + \gamma q^2} \equiv \frac{1}{\gamma} \frac{\xi^2}{1 + q^2 \xi^2} \quad \text{mit} \quad (\text{A.26})$$

$$\xi = \sqrt{-\gamma/4\alpha}. \quad (\text{A.27})$$

Dann unterscheidet sich $\langle(\overline{\delta\phi})^2\rangle$ aber nicht vom normalen Fall,

$$\langle(\overline{\delta\phi})^2\rangle = \frac{A_d T}{\gamma \xi^{d-2}}. \quad (\text{A.28})$$

Andererseits ist $\langle\phi\rangle^2 = \sqrt{|\alpha|/g}$, also lautet das Ginzburg-Kriterium

$$\frac{A_d T 2^{d-2} |\alpha|^{d/2-1}}{\gamma^{d/2}} < \frac{|\alpha|^{1/2}}{g^{1/2}}. \quad (\text{A.29})$$

Wir lesen eine obere kritische Dimension von $d_c = 3$ ab. Da der Ordnungsparameter für $T < T_c$ schneller anwächst, sind Fluktuationen weniger wichtig.

A.5 Gauß'sche Fluktuationen

Betrachte einen dreidimensionalen, uniaxialen Ferromagneten mit der Energie

$$E[T, m(\mathbf{x})] = \int d^3x \left[\frac{\alpha}{2} m^2(\mathbf{x}) + \frac{\beta}{4} m^4(\mathbf{x}) + \frac{\gamma}{2} \nabla m(\mathbf{x}) \cdot \nabla m(\mathbf{x}) \right] \quad (\text{A.30})$$

(Ising-Modell, ϕ^4 -Modell).

(a) Zeige auf einfache Weise, dass die spontane Magnetisierung $\langle m \rangle$ unter Berücksichtigung Gauß'scher Fluktuationen mit dem Resultat der Landau-Theorie übereinstimmt. Somit ändert sich der kritische Exponent β nicht ($\beta = 1/2$).

(b) Bestimme den Erwartungswert $\langle m^2 \rangle$ unter Berücksichtigung Gauß'scher Fluktuationen und vergleiche mit dem Resultat der Landau-Theorie (wie lautet dieses?). Skizziere $\langle m \rangle$ und $m_{\text{rms}} := \sqrt{\langle m^2 \rangle}$ als Funktion von T .

Lösung: (a) Bei Berücksichtigung ausschließlich Gauß'scher Fluktuationen entwickeln wir die Energie bis zur zweiten Ordnung um ihr Minimum. Die resultierende Energie ist symmetrisch in $\delta m = m - \bar{m}$, so dass der Mittelwert $\langle \delta m \rangle = 0$ ist. Daher ist $\langle m \rangle = \bar{m}$.

(b) Landau-Theorie: $\langle m^2 \rangle = \bar{m}^2 = -\alpha/\beta$ für $T < T_c$ sowie 0 für $T \geq T_c$.

Mit Gauß'schen Fluktuationen ist

$$\begin{aligned} \langle m^2 \rangle &= \langle m(0) m(0) \rangle = \langle m(0) \rangle^2 + \mathcal{G}_0(0, 0) \\ &= \bar{m}^2 + k_B T \lim_{\mathbf{x} \rightarrow 0} \frac{1}{4\pi\gamma|\mathbf{x}|} e^{-|\mathbf{x}|/\xi}. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Wir benötigen einen Abschneideparameter für kleine Längenskalen. Da diese großen Wellenzahlen entsprechen, setzen wir diesen als Λ^{-1} :

$$\langle m^2 \rangle = \bar{m}^2 + \frac{k_B T \Lambda}{4\pi\gamma} e^{-1/\Lambda\xi}. \quad (\text{A.32})$$

Für $T \rightarrow T_c$ wird $\xi \rightarrow \infty$ und der Korrekturterm ist endlich, während $\bar{m}^2 \rightarrow 0$. Dies zeigt erneut, dass Fluktuationen nahe bei T_c wesentlich sind. Beachte auch: $\langle m^2 \rangle$ ist stetig und > 0 für alle Temperaturen T . Für $T \rightarrow \infty$ geht es exponentiell gegen Null.

A.6 Goldstone-Moden

Bestimme die Anzahl der Goldstone- und der massiven Fluktuationsmoden der durch die folgenden freien Energien beschriebenen Modelle (Gradiententerme sind jeweils weggelassen). Identifiziere die jeweiligen Moden. Welche Auswirkung hat die Ordnung des Phasenübergangs auf das Auftreten von Goldstone-Moden?

(a) Ordnungsparameter ϕ ,

$$F = -\frac{a}{2}(T - T_0) \cos \phi \quad (a > 0). \quad (\text{A.33})$$

(b) Ordnungsparameter (ϕ_1, ϕ_2) ,

$$F = \frac{a}{2}(T - T_0) (\phi_1^2 + \phi_2^2) - \frac{\beta}{4} (\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 + \frac{\gamma}{6} (\phi_1^2 + \phi_2^2)^3 \quad (a, \beta, \gamma > 0). \quad (\text{A.34})$$

(c) Ordnungsparameter $(\phi_1, \phi_2, \psi_1, \psi_2)$,

$$F = \frac{a}{2}(T - T_0) (\phi_1^2 + \phi_2^2 + \psi_1^2 + \psi_2^2) + \frac{\beta}{4} (\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 + \frac{\beta'}{4} (\psi_1^2 + \psi_2^2)^2 \quad (a, \beta, \beta' > 0). \quad (\text{A.35})$$

(d) Ordnungsparameter (ϕ_1, ϕ_2) ,

$$F = \frac{a}{2}(T - T_0) \phi_1^2 \phi_2^2 + \frac{\beta}{4} \phi_1^4 \phi_2^4 \quad (a, \beta > 0). \quad (\text{A.36})$$

(e) Ordnungsparameter (ϕ_1, ϕ_2) ,

$$F = \frac{a}{2}(T - T_0) \frac{(\phi_1^2 + \phi_2^2)^2}{\phi_1^2} + \frac{\beta}{4} \frac{(\phi_1^2 + \phi_2^2)^4}{\phi_1^4} \quad (a, \beta > 0). \quad (\text{A.37})$$

Hinweise zur Lösung: In (d) hängt die freie Energie nur von $\Phi := \phi_1\phi_2$ ab. Für $T > T_0$ und für $T < T_0$ hat man eine massive Mode, senkrecht zum Tal in $F(\phi_1, \phi_2)$, sowie eine masselose Mode entlang des Tales. Beide Phasen haben gebrochene Symmetrie, da alle ϕ_1, ϕ_2 mit $\phi_1\phi_2 = \bar{\Phi}$ entartet sind, daher $g = g_0 = 0$. Beide sind jedoch von einer „verborgenen“ symmetrischen Phase mit $g_s = 1$ abgeleitet, daher haben beide Phasen $g_s - g = g_s - g_0 = 1$ Goldstone-Mode.

In (e) ergibt sich eine Goldstone-Mode in der Phase $T < T_0$. Das entartete Minimum der freien Energie hat hier die Form zweier sich berührender Kreise.

A.7 Quasi-langreichweitige Ordnung

Betrachte das XY-Modell mit dem Ordnungsparameter (ϕ_1, ϕ_2) in zwei Dimensionen. Für $T < T_c$ hat es in der Gauß'schen Näherung die Korrelationsfunktion

$$\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sim \delta_{ij} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-\eta} \quad \text{mit} \quad \eta = k_B T / 2\pi\gamma\bar{\phi}^2 \quad (\text{A.38})$$

auf großen Längenskalen. Für $T > T_c$ ist dagegen

$$\mathcal{D}_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \sim \delta_{ij} e^{-|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|/\xi}, \quad (\text{A.39})$$

ebenfalls für große $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$. Die Korrelationslänge ist $\xi = \sqrt{\gamma/\alpha}$ und divergiert für $T \rightarrow T_c^+$.

(a) Welche Werte nimmt die Korrelationslänge für $T < T_c$ an?

(b) Bestimme und skizziere $\eta(T)$ und diskutiere das Verhalten für $T \rightarrow T_c^-$. Welchen Wert hat η bei $T = T_c$? Vergleiche mit dem Landau-Resultat $\eta = 0$. Welchen Wert kann man η für $T > T_c$ zuschreiben?

(c) Betrachte ein endliches System der Größe L . Gibt es für $T < T_c$ bzw. $T > T_c$ bestimmte Temperaturen, bei denen sich die Eigenschaften des Systems aufgrund seiner endlichen Größe qualitativ ändern? Schätze diese Temperaturen gegebenenfalls ab. Vergleiche die Ergebnisse mit dem dreidimensionalen Fall.

A.8 Topologische Defekte

A.8.1 Windungszahl von Vortizes

Zeige, dass die Windungszahl von Vortizes gegeben ist durch

$$k = \frac{1}{2\pi} \int d^2x \nabla \times \nabla \theta. \quad (\text{A.40})$$

Dazu muß gezeigt werden, dass diese Gleichung für beliebige Formen von $\theta(\varphi)$ die richtige Windungszahl ergibt! Hinweis: Betrachte zunächst die einfache Form $\theta = k\varphi + \theta_0$ und diskutiere dann, wie man von dieser zur allgemeinen Aussage gelangt.

Lösung: Der Satz von Stokes liefert für die rechte Seite

$$k_\gamma = \frac{1}{2\pi} \oint ds \cdot \nabla \theta, \quad (\text{A.41})$$

wobei sich das Linienintegral über den Rand des Systems erstreckt. Wir betrachten zunächst die Form $\theta = k\varphi + \theta_0$. Hierfür ist

$$k_\gamma = \frac{1}{2\pi} \oint ds \cdot \frac{k\mathbf{e}_\varphi}{R} = \frac{1}{2\pi} 2\pi R \frac{k}{R} = k. \quad (\text{A.42})$$

Dies gilt offensichtlich unabhängig von der Systemgröße R . Ein beliebiger Vortex ergibt sich aus der Addition der speziellen Form für θ und einer beliebigen Funktion ohne Vortizes. Für letztere ist θ überall eindeutig und stetig und man kann θ z.B. nach ebenen Wellen entwickeln. Eine solche hat die Windungszahl

$$k_0 = \frac{1}{2\pi} \int d^2x \nabla \times \nabla \tilde{\theta} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = \frac{\tilde{\theta}}{2\pi} \int d^2x i\mathbf{k} \times i\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = 0. \quad (\text{A.43})$$

Die Anteil ohne Vortizes trägt also nichts bei, was wieder zeigt, dass stetige Verformungen die Windungszahl nicht ändern. Damit ist gezeigt, dass k die Windungszahl für beliebige Realisationen von Vortizes ist.

A.8.2 Windungszahl von Hedgehogs

Wir betrachten eine Hedgehog-Defekt im dreidimensionalen Heisenberg-Modell mit der lokalen Magnetisierung $\mathbf{m}(\mathbf{x})$. Sei $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ der Einheitsvektor parallel zu \mathbf{m} , dann ist die Windungszahl eines Hedgehogs definiert durch

$$k = \frac{1}{8\pi} \int dS_i \epsilon_{ijk} \mathbf{n} \cdot (\nabla_j \mathbf{n} \times \nabla_k \mathbf{n}). \quad (\text{A.44})$$

Überprüfe, dass diese Definition sinnvolle Ergebnisse liefert. Berechne dazu die Windungszahl für folgende Konfigurationen:

$$(a) \quad \mathbf{n} = \mathbf{e}_r \equiv \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} \quad (\text{A.45})$$

$$(b) \quad \mathbf{n} = \mathbf{e}_x \quad (\text{A.46})$$

$$(c) \quad \mathbf{n} = -\mathbf{e}_r \equiv -\frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} \quad (\text{A.47})$$

$$(d) \quad \mathbf{n} = \frac{(x_1, x_2, -x_3)}{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} \quad (\text{A.48})$$

A.8.3 Homotopie-Theorie

(a) Zeige mit Hilfe der Homotopie-Theorie, dass für das XY-Modell in drei Dimensionen keine punktförmigen topologischen Defekte existieren.

(b) Betrachte ein Modell mit dreikomponentigem Ordnungsparameter, dessen Grundzustands-Mannigfaltigkeit M_ϕ in der geordneten Phase die Form eines Torus aufweist. Zeige, dass dieses Modell in zwei Dimensionen punktförmige und in drei Dimensionen linienförmige topologische Defekte hat. Es unterscheidet sich damit vom ebenfalls dreikomponentigen Heisenberg-Modell.

A.8.4 Domänenwände beim Antiferromagneten auf dem Dreiecksgitter

Betrachte ein antiferromagnetisches XY-Modell auf einem zweidimensionalen Dreiecksgitter. Deutlich unterhalb der Molekularfeld-Übergangstemperatur T_0 ist der Betrag der magnetischen Momente in guter Näherung konstant. Die Hamilton-Funktion laute dann

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\text{A.49})$$

mit $J > 0$, $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y)$ und $|\mathbf{S}| = 1$. Die Summe umfasst jede Bindung zwischen nächsten Nachbarn genau einmal.

(a) Welche Konfigurationen nimmt das System im Grundzustand an? Wie sieht die Goldstone-Mode aus? (Zusatzaufgabe: skizziere einen Vortex-Defekt!) Welche *diskrete* Symmetrie ist im geordneten Zustand gebrochen? Eine Skizze wäre hilfreich.

(b) Diskutiere die Existenz und Struktur von Domänenwänden in diesem System. Können sich an einem Punkt drei Wände treffen?

A.9 Skalengesetze

(a) Wir nehmen an, dass die Skalenhypothese gilt. Die Gibbs'sche freie Energie hat dann die Eigenschaft $\lambda G(t, H) = G(\lambda^{\alpha_t} t, \lambda^{\alpha_H} H)$. Beweise daraus die Skalenbeziehungen

$$\alpha = \alpha' \quad \text{und} \quad \alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (\text{A.50})$$

(b) Zeige, dass die Magnetisierung in der Nähe eines Phasenübergangs die Skalenform

$$M = |t|^\beta X_1(H/|t|^\Delta) \quad (\text{A.51})$$

mit dem Exponenten $\Delta = \beta + \gamma$ hat. Zeige, dass die Skalenfunktion X_1 i.A. für $T < T_c$ und $T > T_c$ verschieden ist.

Lösung: (a)

$$C_H(t, H) = -T \frac{\partial^2 G(t, H)}{\partial t^2} = -\lambda^{2\alpha_t - 1} T G^{(2,0)}(\lambda^{\alpha_t} t, \lambda^{\alpha_H} H) = \lambda^{2\alpha_t - 1} C_H(\lambda^{\alpha_t} t, \lambda^{\alpha_H} H). \quad (\text{A.52})$$

Für $H = 0$, $t > 0$ und mit $\lambda = t^{-1/a_t}$ folgt

$$C_H(t, 0) = t^{(1-2a_t)/a_t} C_H(+1, 0) \sim t^{-\alpha} \quad (\text{A.53})$$

und für $t < 0$ mit $\lambda = (-t)^{-1/a_t}$

$$C_H(t, 0) = (-t)^{(1-2a_t)/a_t} C_H(-1, 0) \sim t^{-\alpha'}. \quad (\text{A.54})$$

Es folgt

$$\alpha = \alpha' = \frac{2a_t - 1}{a_t} = 2 - \beta(\delta + 1) \quad (\text{A.55})$$

und mit der Skalenbeziehung $\beta\delta = \gamma + \beta$ folgt

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2. \quad (\text{A.56})$$

(b) Wir haben gesehen, dass

$$M(t, H) = \lambda^{a_H - 1} M(\lambda^{a_t} t, \lambda^{a_H} H). \quad (\text{A.57})$$

Wir setzen $\lambda = |t|^{-1/a_t}$ und erhalten

$$M(t, H) = |t|^{(1-a_H)/a_t} M(\pm 1, H/|t|^{a_H/a_t}) = |t|^\beta M(\pm 1, H/|t|^\Delta), \quad (\text{A.58})$$

da $\beta = (1 - a_H)/a_t$ und $\Delta = a_H/a_t$. Wir erhalten keine Beziehung zwischen $M(+1, H/|t|^\Delta)$ und $M(-1, H/|t|^\Delta)$. Also werden diese beiden Funktionen i.A. verschieden sein.

A.10 Renormierungsgruppen-Theorie

A.10.1 Irrelevante Felder

Betrachte ein irrelevantes Feld h_α . Es verhält sich unter Renormierung wie $h'_\alpha = b^{\lambda_\alpha} h_\alpha$ mit $\lambda_\alpha < 0$. Zeige, dass die Antwort des Systems auf Änderungen von h_α , d.h. die *Suszeptibilität* χ_T^α bezüglich des Feldes h_α , am Phasenübergang beliebig klein wird.

Lösung: (a) Wir hatten gesehen, dass die Gibbs'sche freie Energiedichte skaliert wie

$$g(t, h_\alpha) = b^{-d} g(b^{1/\nu} t, b^{\lambda_\alpha} h_\alpha). \quad (\text{A.59})$$

Mit der Wahl $b = |t|^{-\nu}$ wird daraus

$$g(t, h_\alpha) = |t|^{d\nu} g(\pm 1, h_\alpha |t|^{-\lambda_\alpha \nu}) \equiv |t|^{d\nu} X(h_\alpha |t|^{-\Delta_\alpha}). \quad (\text{A.60})$$

Die Suszeptibilität bezüglich des irrelevanten Feldes h_α ist

$$\chi_T^\alpha \sim -\frac{\partial^2 g}{\partial h_\alpha^2}. \quad (\text{A.61})$$

Sie hat daher die Skalenform

$$\chi_T^\alpha = |t|^{d\nu - 2\Delta_\alpha} X_2(h_\alpha |t|^{-\Delta_\alpha}) \quad \text{mit } \Delta_\alpha = \lambda_\alpha \nu. \quad (\text{A.62})$$

(Probe: für $h_\alpha = h$ ist der Exponent

$$d\nu - 2\Delta = d\nu - 2\gamma - 2\beta = -2\gamma + (d\nu - 2\beta) = -2\gamma + \gamma = -\gamma, \quad (\text{A.63})$$

wie in 7.1.1 und 7.2.3 angegeben. Beachte $\Delta_\nu = (d - \omega)\nu = d\nu - (d - 2 + \eta)\nu/2 = d\nu - \beta = \gamma + \beta$. Da nun $\nu > 0$ und $\Delta_\alpha < 0$ ist $d\nu - 2\Delta_\alpha > 0$ und die Suszeptibilität bezüglich des irrelevanten Feldes verschwindet am kritischen Punkt.

A.10.2 Kadanoff-Konstruktion für diskrete Spinwerte

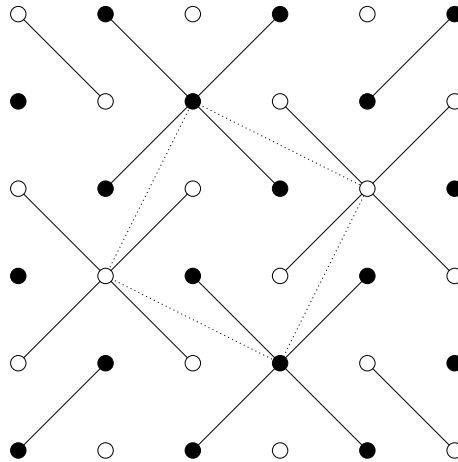
Wir betrachten ein Gitter von Ising-Spins $s_i = \pm 1$. Die normale Kadanoff-Transformation bestünde darin, die Spins zu Zellen zu gruppieren und als neuen Blockspin den Mittelwert der alten Spins einer Zelle zu nehmen. Dabei geht jedoch im allgemeinen die Nebenbedingung $s_i = \pm 1$ verloren, die einerseits für das kritische Verhalten wesentlich sein kann und andererseits numerische Rechnungen erleichtert. Eine näherungsweise Lösung des Problems besteht in einer *Trunkierung* (Abschneiden) der Spins, wobei man alle gemittelten Blockspins mit $s_i > 0$ durch $s_i = +1$ und alle $s_i < 0$ durch $s_i = -1$ ersetzt. Dies entspricht gewissermaßen einem *coarse graining* im Spinraum zusätzlich zum Ortsraum. Diskutiere, warum die Trunkierung eine geeignete Wahl der Zellen erfordert, und gib geeignete Zellen für die folgenden Modelle an. Wie groß ist jeweils der Skalierungsparameter b ?

- (a) Lineare Kette.
- (b) Zweidimensionales Dreiecksgitter.
- (c) Zweidimensionales Quadratgitter.
- (d) Dreidimensionales einfach kubisches Gitter.

Was muss man zusätzlich beachten, wenn man ein antiferromagnetisches System beschreiben will?

Lösung: Die Zellen sollen so definiert sein, dass sie wiederum ein Gitter *derselben* Symmetrie bilden. Zusätzlich soll jetzt der Mittelwert der diskreten Spins entweder positiv oder negativ sein, aber nicht Null. Bei Null gäbe es keine naheliegende Wahl des Blockspins ± 1 .

(a) Jede Wahl mit ungerader Anzahl b von Spins pro Zelle ist geeignet. (b) Z.B. Zellen aus drei Spins, die eine dreieckige Plaquette bilden, sind geeignet, dann ist $b^2 = 3$, also $b = \sqrt{3}$. (c) Auch hier benötigt man eine ungerade Anzahl von Spins pro Zelle. Eine mögliche Wahl mit $b^2 = 5$, $b = \sqrt{5}$, ist:



(d) Wir benötigen eine ungerade Anzahl b^3 von Spins pro Zelle. Die neue Gitterkonstante ist $ba = \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2} a$, wobei n_p ganze Zahlen sein müssen (beschreiben Gittereinheitsvektor $(n_1, n_2, n_3)a$ des neuen Gitters). Es folgt die diophantische Gleichung $(b^3)^2 = (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^3$ mit b^3 und n_p ganzzahlig.

Eine Lösung ist $b^3 = 27$, $(n_1, n_2, n_3) = (2, 2, 1)$: $729 = (4 + 4 + 1)^3$. Die Gittereinheitsvektoren des neuen Gitters sind $(2, 2, 1)a$ und zwei darauf und aufeinander senkrechte Vektoren der gleichen Länge, z.B. $(2, 2, 1)a$, $(-2, 1, 2)a$ und $(1, -2, 2)a$. Die Zelle enthält 27 Gitterplätze oder Spins, von denen keine zwei durch einen Gittervektor des neuen Gitters verbunden sein dürfen. Dafür existieren unendliche viele Möglichkeiten.

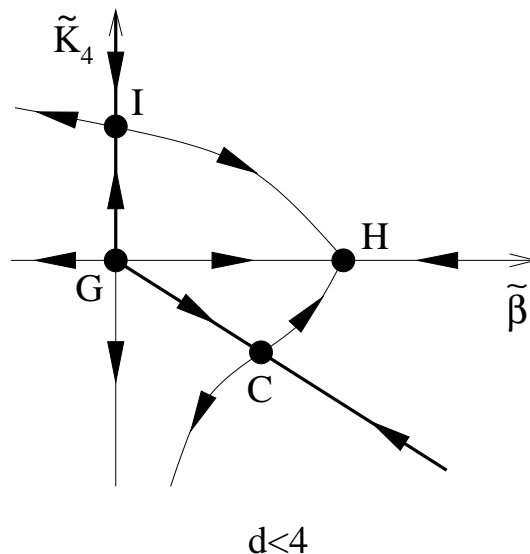
Für ein antiferromagnetisches Gitter sollten nur Spins aus demselben Untergitter zu Zellen zusammengefaßt werden, da sich sonst die Magnetisierung herausmitteln würde.

A.10.3 Renormierungsgruppe und anisotropes Heisenberg-Modell

Wir betrachten ein Heisenberg-Modell in $d < 4$ Dimensionen mit kubischer Anisotropie. Der reduzierte Block-Hamiltonian enthält einen zusätzlichen Term

$$\frac{H_4}{k_B T} = \sum_{\mathbf{x}} \tilde{K}_4 (S_x^4 + S_y^4 + S_z^4). \quad (\text{A.64})$$

Die Renormierung im Impulsraum führt auf die folgenden Renormierungsgruppen-Flüsse, projiziert in den Raum $(\tilde{\beta}, \tilde{K}_4)$:



$\tilde{\alpha}$ ist an allen Fixpunkten relevant (was heißt das?). (a) Diskutiere die möglichen Phasen und Phasenübergänge unter der Annahme, $\tilde{\alpha}$ sei irrelevant. Dann kann man $\tilde{\alpha}$ vernachlässigen. (b) Diskutiere die Phasenübergänge für den tatsächlichen Fall, in dem $\tilde{\alpha}$ relevant ist.

A.10.4 BKT-Theorie mit Termen höherer Ordnung

In den Kosterlitz-Rekursionsgleichungen kann man einen Term höherer Ordnung in der Fugazität y auf heuristischem Weg erhalten, indem man die korrekte Abzählung der Vortex-Antivortex-Paare berücksichtigt. Die Abzählung erfolgt nach folgender Regel: 1. der Vortex und der Antivortex mit dem kleinsten vorkommenden Abstand bilden ein Paar. 2. Wiederhole den ersten Schritt für die verbleibenden ungepaarten Vortizes und Antivortizes. Schließt man Konfigurationen aus, die diese Regel nicht erfüllen, so erhält man die Rekursionsgleichungen

$$\frac{dy}{dl} = (2 - \pi K)y - 2\pi^2 y^3 \quad (\text{A.65})$$

$$\frac{dK}{dl} = -4\pi^3 y^2 K^2. \quad (\text{A.66})$$

Der zusätzliche Term ist negativ, die Fugazität wird durch den Ausschluß bestimmter Konfigurationen reduziert.

(a) Skizziere und diskutiere die Renormierungsgruppen-Flüsse und Fixpunkte für die erweiterten Gleichungen.

(b) Die Gesamtdichte von Paaren ist gegeben durch

$$n_p = \frac{2\pi}{r_c^2} \int_0^\infty dl e^{-2l} y^2(l). \quad (\text{A.67})$$

Zeige, dass diese Dichte für alle Temperaturen endlich ist. Daher ist kein Abschneideparameter notwendig.

Anhang B

Verzeichnis von Lehrbüchern

B.1 Umfassende Darstellungen

- P.M. Chaikin und T.C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995): deckt trotz des Titels wesentliche Teile der Vorlesung ab, gutes „Lesebuch“ mit nützlichem Glossar und Aufgaben.
- H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1971): ein guter Klassiker aus der Zeit vor der Renormierungsgruppentheorie.
- W. Gebhardt und U. Krey, *Phasenübergänge und kritische Phänomene* (Vieweg, Braunschweig, 1980): in deutscher Sprache.
- S.-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena* (W.A. Benjamin, Reading, 1976): ein Klassiker mit guter Einführung in die Renormierungsgruppen-Theorie, Schreibmaschinen-Schrift.
- D.I. Uzunov, *Introduction to the Theory of Critical Phenomena* (World Scientific, Singapur, 1993): ausführlicher und moderner als Stanley, aber die Sprache wirkt etwas mühsam.

B.2 Darstellungen zu Teilbereichen

- W. Greiner, L. Neise und H. Stöcker, *Thermodynamik und Statistische Mechanik* (Verlag Harry Deutsch, Thun, 1987): eines von zahlreichen Lehrbüchern zum Stoff der Vorlesung „Theorie der Wärme“, kritische Phänomene werden nur knapp behandelt.
- L.D. Landau und E.M. Lifshitz, *Statistical Physics, Part I*, 3. Auflage überarbeitet von E.M. Lifshitz und L.P. Pitaevskii (Pergamon Press, Oxford, 1980): Überarbeitetes klassisches Lehrbuch im typischen Landau-Lifshitz-Stil, umfangreicher als Greiner.
- J.-C. Tolédano und P. Tolédano, *The Landau Theory of Phase Transitions* (World Scientific, Singapur, 1987): detaillierte Darstellung der Landau-Theorie, Anwendung der Gruppentheorie.
- D.A. Lavis und G.M. Bell, *Statistical Mechanics of Lattice Systems*, 2 Bd. (Springer, Berlin, 1989): gutes, ausführliches Buch zu exakt lösbaren Modellen und der Renormierungsgruppe.
- A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, New York, 1994): hervorragende Darstellung quantenmechanischer Modelle für magnetische Systeme, mit Diskussion moderner Bosonisierungs-Methoden.
- C. Domb and M.S. Green (Hrsg.), *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Academic Press, New York, 1976): Sammelwerk mit Beiträgen von Experten, definitiv kein Lehrbuch, zum Nachlesen von Details.
- P. Minnhagen, *Reviews of Modern Physics* **59**, 1001 (1987): ausführlicher, guter Übersichtsartikel zur Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Theorie.
- C. Itzykson und J.-M. Drouffe, *Statistical Field Theory*, 2 Bd. (Cambridge University Press, Cambridge, 1989): gutes Buch zu feldtheoretischen Methoden usw.
- D.J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena* (McGraw-Hill, New York, 1978): Blick auf Themen der Vorlesung aus der Sicht der Quantenfeldtheorie, knapp und wenig pädagogisch geschrieben.