

### 3. Kritische Phänomene

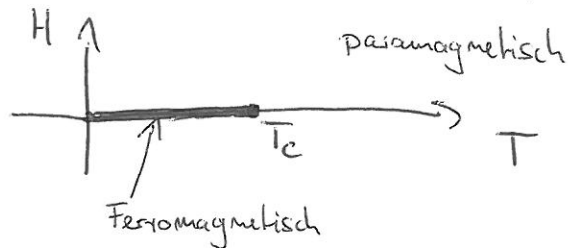
#### 3.1 Einführung, Beispiele

##### (A) Uniaxiale Ferromagnete

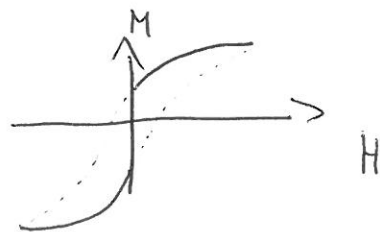
Von besonderem Interesse ist das Verhalten eines Ferromagneten unter Variation der Parameter Temperatur  $T$  und Magnetfeld  $H$ .

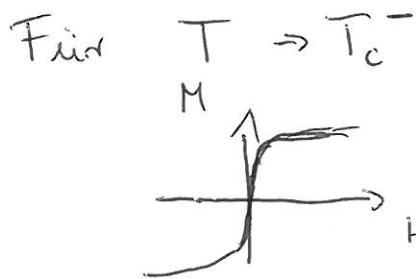
Einfachster Fall: lokale Magnetisierung liegt parallel oder antiparallel zu vorgegebener Achse.

Beobachtung: alle thermodynamischen Größen sind glatte analytische Funktionen von  $T$  und  $H$  (z.B. spezif. Wärme, Suszeptibilität etc.) mit Ausnahme der Linie  $H=0, T \leq T_c$  (Curie-Temperatur)



Für festes  $T < T_c$  ist z.B. die Magnetisierung  $M$  als Fkt. von  $H$  unstetig  $\Rightarrow$  1. Ordnungs-Phasenübergang (endliche Korrelationslänge)





verschwindet die Unstetigkeit

(Korrelationslänge divergiert)

$H=0, T=T_c$  : kritischer (End-)Punkt

1. Ordnungsphasenübergang wird kontinuierlich

( $\rightarrow$  2. Ordnungsphasenübergang, 3. Ord., 4. ...)

Für  $T < T_c$  gibt es zwei mögliche Grundzustände

$M \rightarrow \pm M_0$  (im Abhängigkeit von der Vorgeschichte).

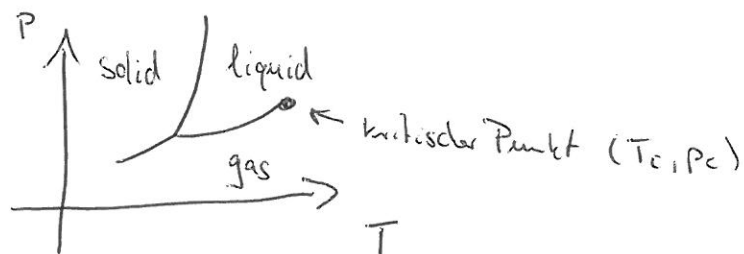
Dies ist ein Beispiel für spontane Symmetriebrechung (SSB), da der Hamiltonian des Systems symmetrisch unter simultaner Umkehr aller Spins ist.

Der "onset" von SSB hängt oft mit der Existenz von kritischen Punkten zusammen.

$M$ : Ordnungsparameter für diesen Übergang (Maß für die Ordnung im System)

(B) Einfache Flüssigkeiten

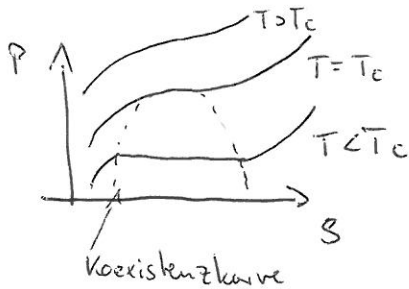
Phasendiagramm einer generischen Substanz in der  $T, P$  Ebene:



Das Phasendiagramm in der Nähe des liquid-gas - Übergangs ähnelt dem des Ferromagneten:

über die liquid-gas Phasengrenze hinweg ist die Dichte  $\rho$  unstetig. Die Unstetigkeit in  $(\rho_{\text{liquid}} - \rho_{\text{gas}})$  verschwindet beim kritischen Punkt  $(T_c, p_c)$

Isothermen nahe dem kritischen Punkt:



$\Rightarrow (P - P_c)$  analog zu  $H$  (Ferromagnet)

$(\rho - \rho_c)$  analog zu  $M$

(NB: Unterschiede:  $\langle \rho \rangle$  im Mittel:  $\rho$  fixiert bei Flüssigkeit  
 $\Rightarrow$  unterhalb der Koexistenzkurve gibt es beide Phasen gleichzeitig

$M$  ist nicht fixiert beim Ferromagneten)

In der Tat trägt die Analogie zwischen solch unterschiedlichen Systemen wie Ferromagneten und einfachen Flüssigkeiten am kritischen Punkt so weit, daß sie sich quantitativ in den gleichen "kritischen Exponenten" niederschlägt.

## 3.2 Kritische Exponenten

Elementares zur statistischen Mechanik

Boltzmann'sche Zustandssumme

$$Z = \text{Tr} e^{-\frac{H}{kT}} = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad (3.1)$$

(Analogie zur QFT:

$$\begin{array}{l} -H \quad \leftrightarrow \quad iS \\ \sum_n \quad \leftrightarrow \quad \int \mathcal{D}\phi \end{array} )$$

Freie Energie (Helmholtz)

$$F = -kT \ln Z \quad (3.2)$$

( $\leftrightarrow W, \Gamma$ )

statistisches Mittel einer Observable

$$\langle X \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n X_n e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad (3.3)$$

einfaches Ferromagnet: Teilchen mit magn. Moment  $\vec{\mu}$  im Feld  $\vec{H}$

$$\text{Energie} \quad E = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}$$

$\Rightarrow$  Hamiltonian für System aus  $N_S$  Spinfreiheitsgraden  $\sigma_i$ ,  $i=1 \dots N_S$

$$H \rightarrow H_0 + H \sum_{i=1}^{N_S} \sigma_i \quad (\text{uniaxial}) \quad (3.4)$$

Magnetisierung:

$$\begin{aligned} M(H, T) &= \frac{1}{N_S} \langle \sum_i \sigma_i \rangle = +kT \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial H} Z \\ &= - \frac{\partial F(H, T)}{\partial H} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Suszeptibilität

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M(H, T)}{\partial H} \quad (3.6)$$

Spezifische Wärme

$$C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \quad (3.7)$$

Spin-Korrelationsfunktion (zusammenhängende 2-Punkt Funktion):

$$G_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (3.8)$$

Asymptotisches Verhalten (für  $T \neq T_c$ ) für Distanz  $\sigma_i, \sigma_j \cong x \rightarrow \infty$ 

$$G(x) \sim \frac{1}{x^\tau} e^{-\frac{x}{\xi}} \quad \left( \tau = \frac{d-1}{2} \text{ für Bewegungsgl. mit Laplace-Charakter} \right) \quad (3.9a)$$

mit Korrelationslänge  $\xi$ .

(Vgl. Korrelationsfunktion in der QFT

$$\Delta(p) = \frac{1}{p^2 + m^2}$$

$$\text{FT: } \Delta(x) \cong \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \left(\frac{m}{x}\right)^{\frac{d-2}{2}} K_{\frac{d-2}{2}}(mx)$$

$$\cong \frac{1}{2^{\frac{d+1}{2}} \pi^{\frac{d-1}{2}}} m^{\frac{d-3}{2}} \frac{1}{x^{\frac{d-1}{2}}} e^{-mx} \quad (3.9b)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\xi}_{\text{stat. physik}} \cong \frac{1}{m} \underbrace{\quad}_{\text{QFT}}$$

Beobachtung: Nahe dem kritischen Punkt folgen die thermodynamischen Größen einfachen Potenzgesetzen.

Def.: reduzierte Temperatur  $t = \frac{T - T_c}{T_c}$   
 reduziertes Magnetfeld  $h = H / kT_c$

"Zoo" der kritischen Exponenten (für Ferromagnet)

$\alpha$ : Spezifische Wärme:  $C \sim A |t|^{-\alpha}$   
 (eigentlich  $\alpha$  und  $\alpha'$  für  $t \geq 0$ , aber RG:  $\alpha = \alpha'$ )

$\beta$ : spontane Magnetisierung:  $\lim_{H \rightarrow 0^+} M \sim (-t)^\beta$

$\gamma$ : Suszeptibilität bei  $H=0$ :  $\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} \sim |t|^{-\gamma}$

$\delta$ : spontane Magnetisierung bei  $T=T_c$ :  $M|_{t=0} \sim |h|^{1/\delta}$

$\nu$ : Korrelationslänge bei  $H=0$ :  $\xi \sim |t|^{-\nu}$

$\eta$ : am kritischen Punkt  $T=T_c$ ; Korrelationsfkt.:

$$G(x) \sim \frac{1}{x^{d-2+\eta}} \quad (3.10)$$

(Analog für einfache Flüssigkeiten:

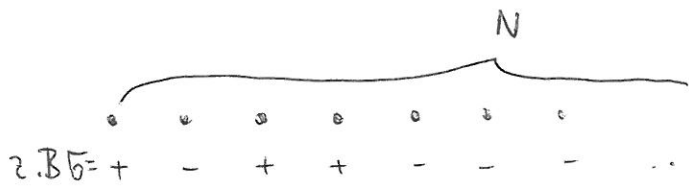
$C_V \sim |t|^{-\alpha}$  bei  $\beta = \beta_c$ ;  $S_{\text{liq.}} - S_{\text{gas}} \sim (-t)^\beta$  (Form der Koexistenzkurve bei  $t \approx 0$ )

isoth. Kompressibilität  $\chi_T \sim |t|^{-\gamma}$ ;  $(p - p_c) \sim |S_{\text{liq.}} - S_{\text{gas}}|^{1/\delta}$  (Form der krit. Isoth. nahe am krit. Punkt)

### 3.3 Ising Modell

Beispiel eines einfachen statistischen System:

Ising Modell in 1 Dimension (Ising 1925)



$$E(\{\sigma\}) = - J \underbrace{\sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1}}_{\text{"Nächste-Nachbar"-WW}} - H \underbrace{\sum_{j=1}^N \sigma_j}_{\text{Kopplung an Magnetfeld } H}, \quad \sigma_j = \pm 1 \quad (3.11)$$

Zustandssumme

$$Z_N = \sum_{\substack{\{\sigma\} \\ \uparrow \\ \text{alle möglichen Konfig.}}} \exp \left( K \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} + h \sum_{j=1}^N \sigma_j \right), \quad K := \frac{J}{kT}, \quad h = \frac{H}{kT} \quad (3.12)$$

Definiere "Transfermatrix":

$$V_{\sigma\sigma'} = \exp \left( K \sigma \sigma' + \frac{h}{2} (\sigma + \sigma') \right)$$

$$V = \begin{matrix} + & \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix} \\ - & \end{matrix} \quad (3.13)$$

$\Rightarrow$  Zustandssumme

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left( K \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{h}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j + \sigma_{j+1}) \right), \quad \sigma_{N+1} := \sigma_1$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow \underline{Z_N} &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{j=1}^N \exp \left( K \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{h}{2} (\sigma_j + \sigma_{j+1}) \right) = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{j=1}^N V_{\sigma_j \sigma_{j+1}} \\
 &= \sum_{\{\sigma\}} V_{\sigma_1 \sigma_2} V_{\sigma_2 \sigma_3} \cdots V_{\sigma_N \sigma_1} \\
 &\equiv \underline{\text{Tr} (V^N)} \qquad (3.14)
 \end{aligned}$$

Berechnung der Zustandssumme ist exakt möglich durch Diagonalisierung der Transfermatrix

$$V = P \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} P^{-1}, \quad \lambda_{1,2} : \text{Eigenwerte von } V \quad (3.15)$$

$$\Rightarrow \underline{\lambda_{1/2}} = e^K \cosh h \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2 h + e^{-2K}} \quad (3.16)$$

$$\text{es gilt: } \begin{cases} \lambda_1 = \lambda_2 & \text{nur für } \underline{H=0} \text{ (} h=0 \text{) und } K \rightarrow \infty, \text{ d.h. } \underline{T \rightarrow 0^+} \\ \lambda_1 > \lambda_2 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.17)$$

Zustandssumme:

$$Z_N = \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (3.18)$$

Freie Energie pro Site

$$F(H, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_N = -kT \ln \lambda_1 \quad \text{für } \lambda_1 > \lambda_2 \quad (3.19)$$



Magnetisierung:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = kT \frac{1}{\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial H}$$

$$= \frac{e^k \sinh h}{\sqrt{e^{2k} \sinh^2 h + e^{-2k}}} = \begin{cases} \text{Graph 1} & T > 0 \\ \text{Graph 2} & T \rightarrow 0^+ \end{cases} \quad (3.20)$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{T_{cr} = 0}} \quad \text{kritische Temperatur} \quad (3.21)$$

Korrelationslänge:

Definiere Spinnmatrix:  $S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$S_{\sigma\sigma'} = \sigma \delta_{\sigma\sigma'} \quad (3.22)$$

Korrelator:  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = ?$

$$\text{z.B. } \langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_1 V_{\sigma_1 \sigma_2} V_{\sigma_2 \sigma_3} \sigma_3 V_{\sigma_3 \sigma_4} \dots$$

$$= \frac{1}{Z_N} \text{Tr} S V^2 S V^{N-2}$$

$$\text{allgem. } \underline{\underline{\langle \sigma_i \sigma_j \rangle}} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} V^{i-1} S V^{j-i} S V^{N-j+1} \quad j > i$$

$$= \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \underline{\underline{S V^{j-i} S V^{N-j+1}}}$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} S V^N$$

(3.23)

Transformationsmatrix  $P$  (vgl. 3.15) kann parametrisiert werden mit

$$P = \begin{pmatrix} \cos \Phi & -\sin \Phi \\ \sin \Phi & \cos \Phi \end{pmatrix}, \quad \Phi = \Phi(K, h) \quad (3.24)$$

$\Phi(K \rightarrow \infty, h=0) \Rightarrow 0$

Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned} G_{ij} &= \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle, \quad j > i \\ &= \frac{1}{Z_N} \text{Tr} S V^{j-i} S V^{N-j+i} - \frac{1}{Z_N^2} (\text{Tr} S V^N)^2 \\ &= \frac{1}{Z_N} \text{Tr} S P \begin{pmatrix} \lambda_1^{j-i} & \\ & \lambda_2^{j-i} \end{pmatrix} P^{-1} S P \begin{pmatrix} \lambda_1^{N-j+i} & \\ & \lambda_2^{N-j+i} \end{pmatrix} P^{-1} - \frac{1}{Z_N^2} (\text{Tr} P^{-1} S P \begin{pmatrix} \lambda_1^N & \\ & \lambda_2^N \end{pmatrix})^2 \\ &= \frac{1}{Z_N} \text{Tr} S \underbrace{P \begin{pmatrix} \lambda_1^{j-i} & \\ & \lambda_2^{j-i} \end{pmatrix} P^{-1}}_{= \begin{pmatrix} \cos 2\Phi & -\sin 2\Phi \\ -\sin 2\Phi & -\cos 2\Phi \end{pmatrix}} S P \begin{pmatrix} \lambda_1^{N-j+i} & \\ & \lambda_2^{N-j+i} \end{pmatrix} P^{-1} - \frac{1}{Z_N^2} (\text{Tr} P^{-1} S P \begin{pmatrix} \lambda_1^N & \\ & \lambda_2^N \end{pmatrix})^2 \\ &= \frac{4\lambda_1^N \lambda_2^N}{(\lambda_1^N + \lambda_2^N)^2} \cos^2 2\Phi + \frac{(\lambda_1^N (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^{j-i} + \lambda_2^N (\frac{\lambda_1}{\lambda_2})^{j-i})}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \sin^2 2\Phi \end{aligned} \quad (3.25)$$

Für  $\lambda_1 > \lambda_2, N \rightarrow \infty, j > i$

$$G_{ij} \approx \sin^2 2\Phi \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{j-i} =: \sin^2 2\Phi e^{-\frac{(j-i) \cdot a}{\xi}} \quad (a: Gitterabstand) \quad (3.26)$$

mit  $\xi = \frac{a}{\ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2}}$  Korrelationslänge (3.27)

$$H=0: \lambda_1 = 2 \cosh K, \lambda_2 = 2 \sinh K \Rightarrow \xi = \frac{a}{\ln \tanh K}$$

$$\text{Für } H=0 : \lim_{T \rightarrow 0^+} \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = 1 \Rightarrow \underline{\underline{\xi \rightarrow \infty}} \quad (3.28)$$

$\Rightarrow$  Korrelationslänge divergiert am kritischen Punkt!

$\Rightarrow$  Die Referenz zu einer Längenskala verschwindet.

$\Rightarrow$  Skaleninvarianz

Kritische Exponenten:

$$\eta: G_{ij} \sim \frac{1}{(i-j)^{d-2+\eta}}$$

$$\text{für } \lambda_2 \rightarrow \lambda_1 : \Phi = 0 \Rightarrow G_{ij} = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\eta = 1}$$

(3.29)

$$\beta: \lim_{H \rightarrow 0^+} M = 0 \stackrel{!}{\sim} (-t)^{\beta} \Rightarrow \boxed{\beta = 0}$$

$$\delta: M|_{T=T_c=0} = 1 \stackrel{!}{\sim} |h|^{1/\delta} \Rightarrow \boxed{\delta = \infty}$$

(Die definierenden Größen der anderen kritischen Exponenten zeigen kein Potenzverhalten, sondern wesentliche Singularitäten ( $d=1!$ ))

$$\text{z.B. } \xi = \frac{a}{\ln |t| h K} \sim a e^{2K} = a e^{\frac{2J}{kT}} \quad )$$