

# Theorie der Phasenübergänge

PROF. DR. W. DIETERICH  
FACHBEREICH PHYSIK  
UNIVERSITÄT KONSTANZ

Auszüge aus den Vorlesungen "Theorie der Phasenübergänge", SS 1995  
und "Phase Transitions and Critical Phenomena" (mit P. Leiderer), WS 1999/2000

LATEX-Version: R. Beck  
Abbildungen: D. Reinke

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Phänomenologische Grundlagen</b>	<b>3</b>
1.1	Thermodynamische Beschreibung von Phasenübergängen, Ordnungsparameter . . . . .	3
1.2	Landau–Theorie . . . . .	12
<b>2</b>	<b>Statistische Mechanik</b>	<b>19</b>
2.1	Modellsysteme . . . . .	19
2.2	Thermodynamik und Fluktuationen . . . . .	24
2.3	Molekularfeld–Approximation (MFA) . . . . .	27
2.4	Thermodynamik binärer Mischungen . . . . .	35
2.5	Ginzburg–Landau Theorie . . . . .	39
2.6	Ginzburg–Kriterium, kritischer Bereich . . . . .	48
<b>3</b>	<b>Statische kritische Phänomene</b>	<b>51</b>
3.1	Skalenhypothese . . . . .	51
3.2	Renormierung im Ortsraum . . . . .	55
3.3	Renormierung im Impulsraum . . . . .	65
3.4	Gaußsches Modell, $\epsilon$ –Entwicklung . . . . .	72

# Allgemeine Literatur

P.M. Chaikin, T.C. Lubensky, "Principles of condensed matter physics" (Cambridge University Press, 1995).

F. Schwabl, "Statistische Mechanik" (Springer Verlag, 2000).

W. Gebhardt, U. Krey, "Phasenübergänge und kritische Phänomene" (Friedr. Vieweg & Sohn, 1980).

S.-K. Ma, "Modern Theory of Critical Phenomena" (W.A. Benjamin Inc., 1976).

J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, M.E.J. Newman, "The Theory of Critical Phenomena" (Oxford University Press, 1992).

# Kapitel 1

## Phänomenologische Grundlagen

### 1.1 Thermodynamische Beschreibung von Phasenübergängen, Ordnungsparameter

Verfolgt man die Gleichgewichtszustände einer bestimmten Substanz makroskopischer Ausdehnung während des Abkühlens von sehr hohen Temperaturen aus, so lassen sich mehrere Phasen mit jeweils charakteristischen thermodynamischen Eigenschaften unterscheiden. Stark vereinfacht findet man mit abnehmender Temperatur die Abfolge:

Plasma (Ionen + Elektronen)  
atomares Gas  
molekulares Gas  
Flüssigkeit  
kristalliner Festkörper

Man erkennt daran bereits, daß in jedem Schritt Bindungsenergie gewonnen wird. Gleichzeitig wird eine Abnahme der Entropie in Kauf genommen, die jedoch mit sinkender Temperatur an Bedeutung verliert.

Innerhalb des flüssigen und festen Zustands begegnet man darüber hinaus einer großen Vielfalt an Phasenübergängen. Bestimmte, aus anisotropen Molekülen bestehende Flüssigkeiten bilden flüssige Kristalle. Helium, welches als einzige Substanz unter Normaldruck bis  $T = 0$  K flüssig bleibt, zeigt die Erscheinung der Superfluidität. Innerhalb des Festkörperbereichs finden sich je nach Temperatur  $T$  und Druck  $p$  im allgemeinen mehrere Phasen mit unterschiedlichen Kristallstrukturen. Abgesehen von strukturellen Übergängen sind magnetische Phasenübergänge und die Supraleitung von besonderem Interesse.

Ein eigenes Gebiet bilden Phasenübergänge in Verbindung mit Festkörperoberflächen (Oberflächen-Rekonstruktionen, Rauigkeitsübergänge, Benetzungsübergänge, Phasenübergänge in Adsorbatsystemen etc.).

## Beispiele

- i) Molekulares System–Gas/Flüssigkeit/Festkörper.

Betrachtet wird ein 1–komponentiges System mit fester Molekülzahl  $N$ . Zwischen den Variablen  $p$  (Druck),  $V$  (Volumen) und  $T$  (Temperatur) besteht ein Zusammenhang  $p = p(V, T)$ , der sich als *Zustandsfläche* im  $(p, V, T)$ –Diagramm nach Abb. (1.1) darstellen läßt. Verschiedene, durch Unstetigkeiten in der extensiven Variablen  $V$  getrennte “Blätter” der Zustandsfläche repräsentieren jeweils die thermische Zustandsgleichung verschiedener Phasen. (Da die extensiven Größen  $N$  und  $V$  nur durch ihr Verhältnis  $n = N/V$  (Anzahldichte) eingehen, kann man auch die Funktion  $p = p(n, T)$  betrachten.) Diese Unstetigkeiten definieren nach Projektion der Zustandsfläche in die  $(p, T)$ –Ebene Linien, entlang deren jeweils zwei Phasen koexistieren. Bei gegebenem Druck kann man daran die Übergangstemperaturen für Verdampfung, Gefrieren und Sublimation ablesen. Das so entstehende Phasendiagramm in der  $(p, T)$ –Ebene, Abb. (1.2a), weist zwei charakteristische Punkte auf. Am *Tripelpunkt* können die drei Phasen Gas, Flüssigkeit und Festkörper koexistieren, vgl. die Gibbs’sche Phasenregel. Bewegt man sich entlang der Koexistenzkurve Gas/Flüssigkeit zu höheren Temperaturen hin, so nimmt der Dichteunterschied beider Phasen kontinuierlich ab und verschwindet am Endpunkt der Koexistenzkurve, dem *kritischen Punkt*. Abb.(1.2b) zeigt das Phasendiagramm in der  $(T, n)$ –Ebene.

- ii) Magnetisches System–Paramagnet/Ferromagnet.

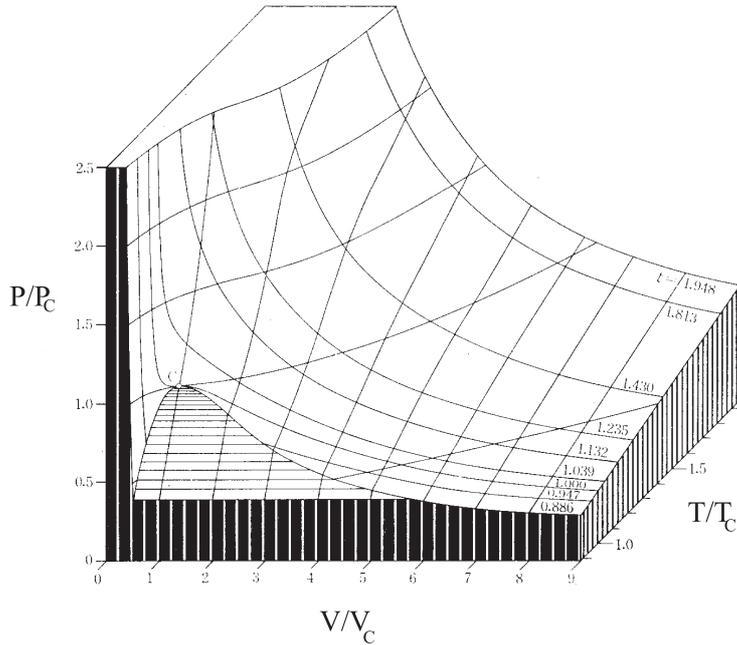
Betrachtet wird ein uniaxialer Magnet, dessen magnetisches Moment nur längs einer einzigen, durch die Kristallgeometrie gegebenen Achse ausgerichtet ist. Die Zustandsfläche, die den Zusammenhang zwischen  $B$  (äußeres Feld),  $M_{ges}$  (magnetisches Gesamtmoment) und  $T$  darstellt, zeigt Ähnlichkeit mit Abb.(1.1) im Bereich des Übergangs Gas/Flüssigkeit. Dabei entsprechen sich die Größen  $V \hat{=} M_{ges}$  und  $p \hat{=} -B$ ; vergleiche die Ausdrücke für die quasistatische Arbeit  $\delta A_V = -pdV$  bei Volumenänderung bzw.  $\delta A_{magn} = BdM_{ges}$  bei Änderung des magnetischen Moments. Nach Projektion in die  $(B, T)$ –Ebene entsteht das Phasendiagramm Abb.(1.3), welches Abb.(1.2a) analog ist; die Magnetisierung  $M = M_{ges}/V$  in Abhängigkeit von  $T$  für verschiedene  $B$  zeigt Abb.(1.4).

## 2–Phasen–Koexistenz

Nach den Regeln der Thermodynamik (Maximumprinzip der Entropie) kann man aus der Kenntnis der thermodynamischen Potentiale von zwei getrennten Phasen auf die Bedingungen schließen, unter denen sie koexistieren. Wir ziehen wieder das Beispiel Gas/Flüssigkeit heran. Die Koexistenzbedingungen lauten:

$$T_g = T_{fl}, \quad p_g = p_{fl}, \quad \mu_g = \mu_{fl} \quad (1.1)$$

Das chemische Potential  $\mu$  einer (homogenen) Phase ist identisch mit ihrer freien Enthalpie (Gibbs’sche freie Energie) pro Teilchen,  $\mu = G/N$ . Die Auswertung der Bedingung  $\mu_g(T, p) = \mu_{fl}(T, p)$  entlang der Koexistenzkurve führt mit  $d\mu = -s dT + v dp$  ( $s = S/N$  Entropie pro Teilchen,  $v = V/N = n^{-1}$  Volumen pro Teilchen) auf die Gleichung von Clausius–Clapeyron:



**Abbildung 1.1:** Zustandsfläche von Argon in den Variablen  $p, V, T$ , bezogen auf den kritischen Punkt ( $p_c = 48.62\text{bar}$ ,  $V_c = 1.8839\text{ cm}^3/\text{g}$ ,  $T_c = 150.72\text{K}$ )

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{K\text{oex.}} = \frac{s_g - s_{fl}}{v_g - v_{fl}} \quad (1.2)$$

Dabei ist  $q = T(s_g - s_{fl})$  die Übergangswärme (latente Wärme) pro Teilchen.

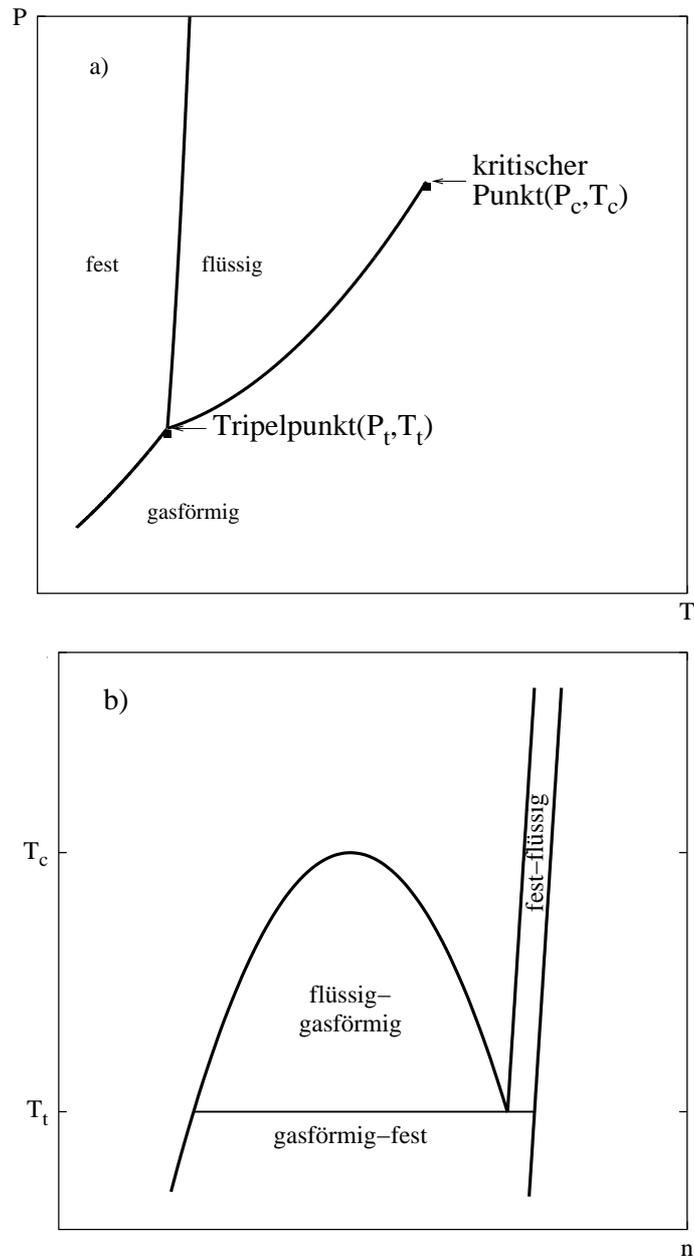
### Ehrenfest-Klassifikation

Vergleicht man die Potentiale  $G_g(T, p, N) = N\mu_g(T, p)$  mit  $G_{fl}(T, p, N) = N\mu_{fl}(T, p)$  so gilt am Übergang  $G_g = G_{fl}$ , jedoch sind die 1. partiellen Ableitungen ( $S = -\partial G/\partial T$ ;  $V = \partial G/\partial p$ ) verschieden:  $S_g > S_{fl}$ ;  $V_g > V_{fl}$ . Die Differenzen dieser Größen gehen gerade in (1.2) ein. Nach der Klassifikation von Ehrenfest bezeichnet man diesen Übergang als einen *Phasenübergang 1. Art*. Am kritischen Punkt ( $p_c, T_c$ ) mit der (jetzt eindeutigen) kritischen Dichte  $n_c$  ist  $S_g = S_{fl}$  (keine latente Wärme) und  $V_g = V_{fl}$ , jedoch treten in den 2. partiellen Ableitungen Unstetigkeiten (Singularitäten) auf, z. B. in der isothermen Kompressibilität

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 G}{\partial p^2} \quad (1.3)$$

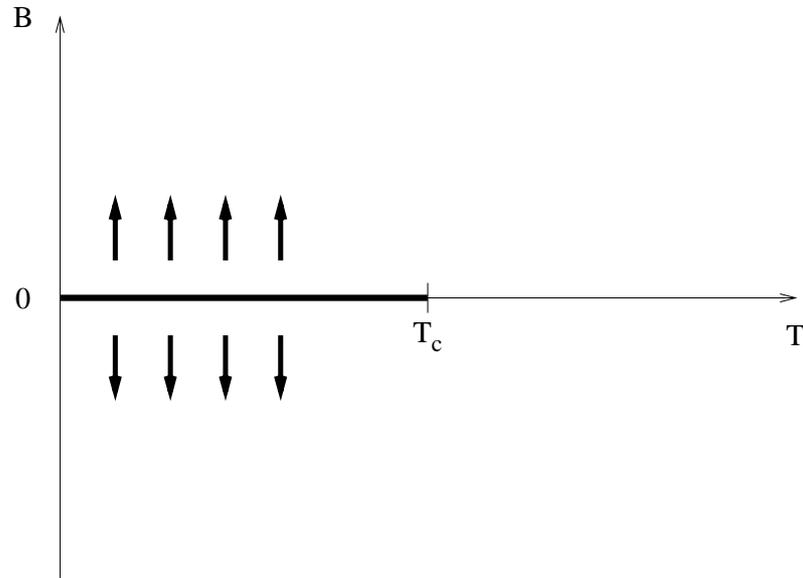
Man spricht dann von einem *Phasenübergang 2. Art*. Ein anderes Beispiel für einen Phasenübergang 2. Art ist der Übergang Normalleiter/Supraleiter, der mit einem Sprung in der Wärmekapazität

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \quad (1.4)$$

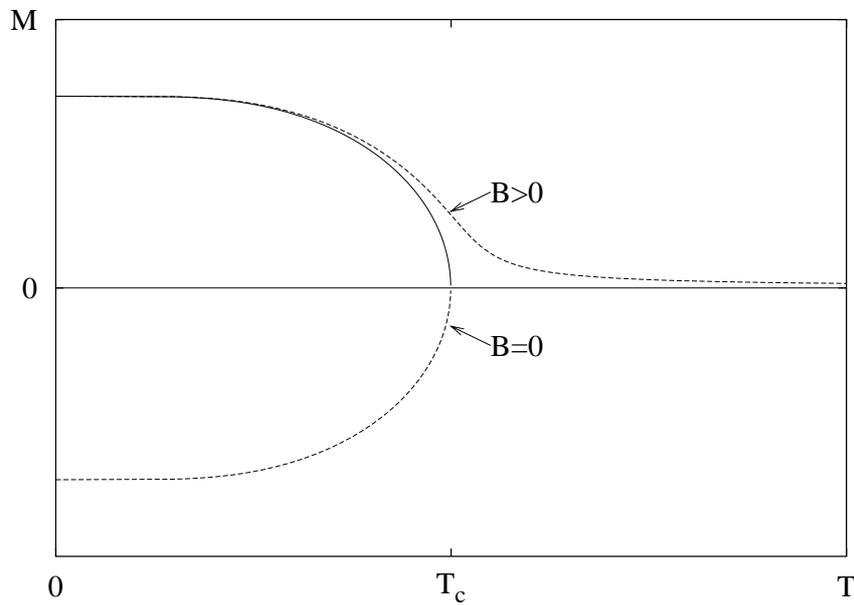


**Abbildung 1.2:** a) Phasendiagramm (schematisch) eines 1-komponentigen molekularen Systems in der  $(p, T)$ -Ebene und b) in der  $(T, n)$ -Ebene.

verknüpft ist. (Gl.(1.4) definiert die Wärmekapazität bei konstantem Druck.) Nach dem gleichen Muster lassen sich Übergänge höherer Ordnung definieren. Für alles Weitere bleibt die Unterscheidung zwischen Phasenübergängen 1. Art und den sonstigen, "kontinuierlichen Übergängen" wichtig. Auf eine Klassifizierung der kontinuierlichen Übergänge nach heutigen Gesichtspunkten wird später eingegangen.



**Abbildung 1.3:** Phasendiagramm eines uniaxialen Ferromagneten in der  $(B, T)$ -Ebene. Unterhalb der kritischen Temperatur  $T_c$  koexistieren bei  $B = 0$  zwei Phasen mit entgegengesetzter Magnetisierung.



**Abbildung 1.4:** Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung eines Ferromagneten für verschiedene äußere Felder  $B$ .

System	Ordnungsparameter	Beispiel	kritische Temperatur
Flüssigkeit/Gas	Anzahldichte $n - n_c$	H <sub>2</sub> O	$T_c = 647.03K$
Flüssigkeit/Kristall	$n_{\vec{G}}$	H <sub>2</sub> O	
Ferromagnetismus	magnetisches Moment	Fe	1044.0K
Antiferromagnetismus	magnetisches Moment eines Untergitters	FeF <sub>2</sub>	78.26K
Ferroelektrizität	elektrisches Dipolmoment	BaTiO <sub>3</sub>	493K
binäre Mischung	$n_1 - n_2$	CCl <sub>4</sub> – C <sub>7</sub> F <sub>14</sub>	301.75K
$\lambda$ -Linie <sup>4</sup> He	<sup>4</sup> He-Amplitude(komplex)	<sup>4</sup> He	1.8K-2.1K
Supraleitung	Cooper- Paar-Amplitude(komplex)	Pb	7.19K

Tabelle 1 : Beispiele von Phasenübergängen und zugehörige Ordnungsparameter

### Phasenübergänge und Symmetriebrechung

Kennzeichen eines Phasenübergangs ist in den allermeisten Fällen eine Symmetrieänderung: gewisse Symmetrien der Hochtemperaturphase werden in der Phase bei tieferer Temperatur gebrochen. Gleichzeitig nimmt die Ordnung zu, begleitet von einer Abnahme der Entropie. Daß Erniedrigung der Symmetrie und Zunahme der Ordnung simultan vonstatten gehen, zeigt anschaulich das Beispiel des Systems Flüssigkeit/Kristall. Der Gleichgewichtszustand einer unendlich ausgedehnten Flüssigkeit ist invariant gegenüber beliebigen räumlichen Translationen, während der Kristall nur gegenüber einer Untergruppe, den diskreten Gittertranslationen invariant ist; als Folge der kristallinen Ordnung ist die Symmetrie gegenüber kontinuierlichen Translationen gebrochen. Beim uniaxialen Magneten wird die Inversionssymmetrie der ferromagnetischen Phase gegenüber der paramagnetischen Phase gebrochen. Näheres zum Konzept der Symmetriebrechung findet sich in § 2.2.

### Ordnungsparameter, konjugiertes Feld

Als *Ordnungsparameter*  $\phi$  bezeichnet man allgemein den Mittelwert einer (oder mehrerer) extensiver Observablen, bezogen auf das Volumen  $V$ , welche gerade denjenigen Ordnungszustand zum Ausdruck bringen, der die Tieftemperaturphase gegenüber der Hochtemperaturphase auszeichnet. Im eben erwähnten Beispiel Flüssigkeit/Kristall bilden die Fourierkomponenten  $n_{\vec{G}}$  der gemittelten atomaren Dichte zu den reziproken Gittervektoren  $\vec{G}$  den Ordnungsparameter; für einen uniaxialen Magneten genügt eine 1-komponentige Größe, die mittlere Magnetisierungsdichte  $M$  längs der ausgezeichneten Achse. Der Übergang Flüssigkeit/Gas, bei dem keine Symmetriebrechung vorliegt, läßt sich problemlos in die Überlegung einbeziehen, wenn man die Anzahldichte relativ zur kritischen Dichte,  $n - n_c$ , als Ordnungsparameter ansieht. Eine Übersicht über die wichtigsten physikalischen Typen von Übergängen mit den zugehörigen Ordnungsparametern zeigt Tabelle 1. Wie Ordnungsparameter von der Statistischen Mechanik her zu definieren sind, wird in § 2.2 ausgeführt.

Um die Thermodynamik der geordneten Phase behandeln zu können, benötigt man ein thermodynamisches Potential mit dem Ordnungsparameter  $\phi$  als unabhängige Variable, z. B. die freie Energie  $F(\phi)$ , bzw. ihre Dichte  $f = F/V$ , vgl. § 1.2. Damit läßt

sich ein zu  $\phi$  konjugiertes Feld gemäß  $h = \partial f / \partial \phi$  einführen. Bei einem Ferromagneten entspricht  $h$  dem äußeren Magnetfeld, bei einem fluiden System Flüssigkeit/Gas im Wesentlichen dem chemischen Potential  $\mu = \partial f(n, T) / \partial n$ , wenn wir  $\phi = n - n_c$  setzen.

Umgekehrt gewinnt man den Ordnungsparameter aus der Legendre-Transformierten  $f_h = f - h \phi$  mittels

$$\phi = -\partial f_h / \partial h \quad (1.5)$$

Die Ordnungsparameter-Suszeptibilität folgt durch nochmaliges Differenzieren,

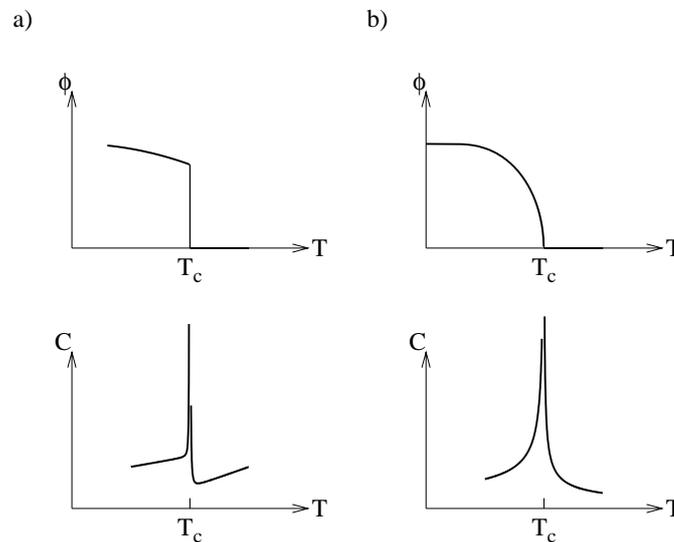
$$\chi = \frac{\partial \phi}{\partial h} = -\frac{\partial^2 f_h}{\partial h^2} \quad (1.6)$$

In fluiden Systemen ist  $\chi = \partial n(\mu, T) / \partial \mu = n^2 \kappa_T$ , wobei

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = \frac{1}{n} \left( \frac{\partial n}{\partial p} \right)_T \quad (1.7)$$

die isotherme Kompressibilität darstellt.

Verhält sich der Ordnungsparameter  $\phi$  unstetig am Übergangspunkt, so liegt in Übereinstimmung mit Ehrenfest ein Phasenübergang 1. Art vor. Abb. (1.5) zeigt das typische Verhalten des Ordnungsparameters und der Wärmekapazität bei Übergängen 1. Art und bei kontinuierlichen Übergängen.



**Abbildung 1.5:** Schematisches Verhalten des Ordnungsparameters und der Wärmekapazität bei Phasenübergängen 1. Art (a) und kontinuierlichen Übergängen (b). Im Fall a) tritt eine latente Wärme auf, die sich als  $\delta$ -artige Singularität in der Wärmekapazität äußert.

### Kritische Exponenten, Universalität

Von jetzt ab betrachten wir kontinuierliche Übergänge. In den 2. partiellen Ableitungen der freien Energie treten am kritischen Punkt Singularitäten auf. Experimente zeigen, daß die entsprechenden physikalischen Größen bei Annäherung an den kritischen Punkt nach Art von *Potenzgesetzen* divergieren. Ebenso zeigt sich, daß der Ordnungsparameter entlang der Koexistenzkurve nach einem Potenzgesetz am kritischen Punkt verschwindet. Demzufolge lassen sich *kritische Exponenten* definieren, welche das singuläre Verhalten der Meßgrößen *asymptotisch* im Grenzfall  $T \rightarrow T_c$  bzw.  $h \rightarrow 0$  charakterisieren:

Ordnungsparameter

$$\phi \simeq B(T_c - T)^\beta; \quad T < T_c \quad (1.8)$$

$$\phi \simeq D(\text{sgn } h)|h|^{1/\delta}; \quad T = T_c; \quad h \rightarrow 0 \quad (1.9)$$

Suszeptibilität

$$\chi \simeq \begin{cases} \Gamma_+(T - T_c)^{-\gamma}; & T > T_c \\ \Gamma_-(T_c - T)^{-\gamma'}; & T < T_c \end{cases} \quad (1.10)$$

Wärmekapazität

$$C_V \simeq \begin{cases} A_+(T - T_c)^{-\alpha}; & T > T_c \\ A_-(T_c - T)^{-\alpha'}; & T < T_c \end{cases} \quad (1.11)$$

Diese Definitionen beziehen sich auf folgende Wege auf der Zustandsfläche. Für  $T < T_c$  bewegt man sich entlang der Koexistenzkurve in einer der beiden Phasen. Bei  $T > T_c$  ist  $\phi \equiv 0$  aufrechtzuerhalten; im Fall von Fluiden bewegt man sich also entlang der kritischen Isochoren  $n = n_c$ . Der Exponent  $\delta$  ist definiert auf einem Weg entlang der kritischen Isothermen. Bei Fluiden ist für  $T = T_c$  das Feld  $h$  durch  $\mu - \mu_c$  zu ersetzen; wegen  $\mu - \mu_c \simeq \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_c (p - p_c)$  ergibt (1.9) bis auf konstante Faktoren  $n - n_c \sim -\text{sgn}(p - p_c)|p - p_c|^{1/\delta}$ .

Die so eingeführten kritischen Exponenten variieren bei fester Dimensionalität  $d$  von System zu System nur wenig. Typische Zahlenwerte bei  $d = 3$  liegen etwa bei  $\beta \sim 1/3$ ;  $\gamma \sim 4/3$ ;  $\alpha \sim 0.1$ . In speziellen Fällen ist  $\alpha = 0$ ; dies bedeutet, daß die führende Singularität in der Wärmekapazität schwächer ist als jede negative Potenz von  $|T - T_c|$ . So findet man in der Wärmekapazität von flüssigem  $^4\text{He}$  am  $\lambda$ -Übergang eine logarithmische Divergenz in der Wärmekapazität.

Genaue Messungen führen auf Erkenntnisse über die *kritischen Phänomene*, die erst aus einem tieferen Verständnis kontinuierlicher Phasenübergänge heraus erklärbar sind (vgl. §3):

i) Universalität der kritischen Exponenten

Flüssigkeit/Gas-Übergänge in  $d = 3$  sind generell durch  $\beta \simeq 0.32$ ,  $\gamma \simeq 1.24$ ,  $\alpha \simeq$

0.11 und  $\delta \simeq 4.8$  gekennzeichnet, *unabhängig* von der genauen Art der Wechselwirkung zwischen den Molekülen. Dieselben Exponenten findet man auch bei  $3d$  uniaxialen Ferromagneten. Alle *isotropen*  $3d$  Ferromagnete zeigen leicht geänderte, untereinander aber wiederum einheitliche Werte für die kritischen Exponenten. In  $d = 2$  findet man bei uniaxialen Ferromagneten und Fluiden  $\beta = 1/8$ ;  $\gamma = 7/4$ ;  $\alpha = 0$  und  $\delta = 15$ . Die Systeme lassen sich also *Klassen* zuordnen, mit *universell* gültigen Exponenten innerhalb einer Klasse.

ii) Skalenrelationen

Zwischen den Exponenten bestehen Beziehungen, die sogenannten Skalenrelationen. Insbesondere gilt

$$\alpha = \alpha'; \quad \gamma = \gamma' \quad (1.12)$$

sowie

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (1.13)$$

und

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (1.14)$$

Weitere kritische Exponenten und weitere Skalenrelationen werden in § 3.1 eingeführt. Insgesamt verbleiben zwei unabhängige kritische Exponenten.

iii) Skalenverhalten

Messungen etwa der Zustandsgleichung in hinreichender Nähe des kritischen Punktes zeigen, daß die Abhängigkeit des Ordnungsparameters von  $T - T_c$  und  $h$  sich durch eine Funktion nur *einer* Variablen darstellen läßt, in der  $T - T_c$  und  $h$  in einer ganz bestimmten Kombination auftreten. Diese "Skalenfunktion" besitzt ebenfalls Universalitätseigenschaften, in gewisser Analogie zu einem "Gesetz der korrespondierenden Zustände".

Die Punkte ii) und iii) sind eine unmittelbare Folge der in § 3.1 diskutierten Skalenhypothese. Skaleneigenschaften und Existenz von Universalitätsklassen lassen sich aus der Renormierungsgruppentheorie verstehen. Die Universalitätsklassen definieren sich im Wesentlichen nach der räumlichen Dimension  $d$  des Systems und der Symmetrie des Ordnungsparameters.

## 1.2 Landau–Theorie

Die Landau–Theorie (L.D. Landau 1937) gestattet eine besonders einfache, gleichzeitig weitgehend allgemeine Beschreibung des elementaren Systemverhaltens bei Phasenübergängen mit Symmetriebrechung. Ausgangspunkt ist zunächst die folgende, allgemein gültige Überlegung. Es sei  $F(T, \phi)$  die freie Energie des Systems zu vorgegebenem Ordnungsparameter  $\phi$ . Prinzipiell kann man sich  $F(T, \phi)$  nach den Regeln der Statistischen Mechanik definiert denken mittels einer eingeschränkten kanonischen Zustandssumme, in der nur über diejenigen Mikrozustände summiert wird, die mit  $\phi$  verträglich sind. Welche Phase bei der Temperatur  $T$  vorliegt, bestimmt sich durch Minimierung von  $F(T, \phi)$ . Wird  $F$  durch  $\phi_0 \neq 0$  minimiert, so ist im Gleichgewicht die geordnete Phase, d.h. die Phase mit geringerer Symmetrie, die stabile. (Eventuell existieren mehrere äquivalente geordnete Phasen.) Andernfalls wird die ungeordnete Phase ( $\phi_0 = 0$ ) eingenommen.

Nach Landau geht man von der Annahme aus, daß in der Nähe der Übergangstemperatur zwischen beiden Phasen der Ordnungsparameter  $\phi$  klein ist, so daß man  $F(T, \phi)$  nach Potenzen von  $\phi$  entwickeln kann. (Deswegen ist die Landau–Theorie in erster Linie für Phasenübergänge zweiter Art zuständig.) Die Koeffizienten in dieser Entwicklung, die sogenannten Landau–Koeffizienten, sind phänomenologische Parameter. Wir betrachten zunächst den einfachsten Fall eines 1–komponentigen (skalaren) Ordnungsparameters und eine freie Energie mit der Symmetrie  $F(T, \phi) = F(T, -\phi)$ , wie sie z.B. bei einem Ising–Ferromagneten vorliegt.  $\phi$  ist dabei gleich der gemittelten Magnetisierungsdichte. Somit treten in der Landau–Entwicklung nur gerade Potenzen in  $\phi$  auf. Für die Dichte der Differenz der freien Energien zwischen beiden Phasen,  $f = \Delta F/V$ ;  $\Delta F = F(T, \phi) - F(T, 0)$ ;  $V$ =System–Volumen, können wir daher schreiben

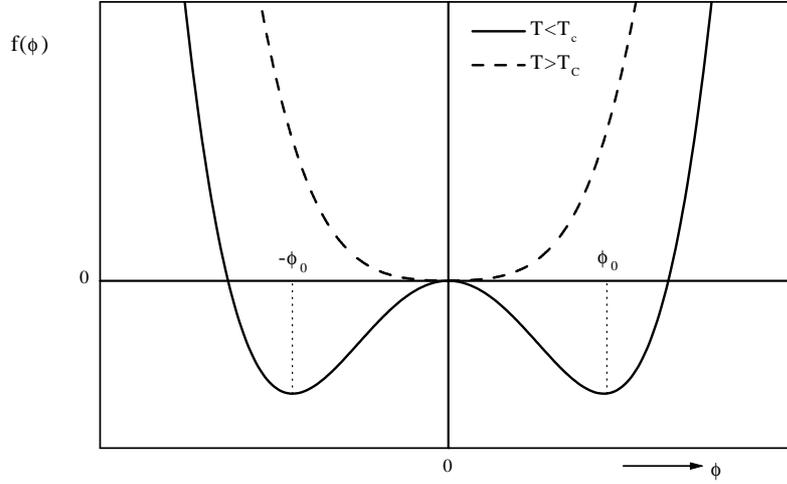
$$f(\phi) = \frac{r}{2}\phi^2 + u\phi^4 + \dots \quad (1.15)$$

Unter der Annahme  $u > 0$  werde diese Entwicklung nach dem Term  $\propto \phi^4$  abgebrochen. Entscheidend für das Auftreten eines Phasenübergangs ist ein Vorzeichenwechsel von  $r = r(T)$  bei Temperaturänderung: Die Bedingung  $r(T_c) = 0$  bestimmt die kritische Temperatur  $T_c$  des Übergangs. Nahe  $T_c$  können wir annehmen, daß

$$\begin{aligned} r(T) &= r_0 \frac{T - T_c}{T_c}; \quad r_0 > 0 \\ u(T) &\simeq u(T_c) \equiv u > 0 \end{aligned} \quad (1.16)$$

Abb.(1.6) stellt den schematischen Verlauf von  $f(\phi)$  für die beiden Fälle  $T \lesseqgtr T_c$  dar. Notwendig zur Bestimmung von  $\phi_0$  ist die Gleichung  $\partial f/\partial \phi = r\phi + 4u\phi^3 = 0$ . Es ergibt sich

$$\phi_0(T) = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \pm \left( \frac{|r(T)|}{4u} \right)^{1/2} & T < T_c \end{cases} \quad \text{falls} \quad (1.17)$$



**Abbildung 1.6:**  $\phi$ -Abhängigkeit der Dichte der freien Energie (1.15) für  $T > T_c$  bzw.  $T < T_c$ .

d.h. bei  $r < 0$  ( $T < T_c$ ) ist die geordnete Phase stabil, im umgekehrten Fall die ungeordnete. Für  $T \nearrow T_c$  verschwindet der physikalisch beobachtete Ordnungsparameter  $\phi_0(T)$  stetig, mit  $\phi_0(T) \propto (T_c - T)^{1/2}$ . Der kritische Exponent  $\beta$ , vgl. (1.8), hat also in der Landau-Theorie den Wert  $1/2$ .

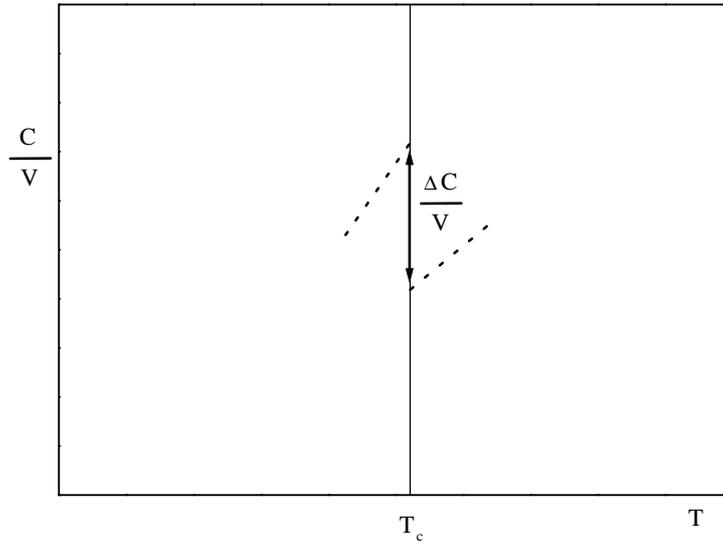
Mit diesen Ergebnissen folgt unmittelbar, daß die Wärmekapazität für festes Volumen

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F(T, \phi_0(T))}{\partial T^2} \quad (1.18)$$

bei  $T_c$  einen Sprung zeigt, der kritische Exponent  $\alpha$ , siehe (1.11), also gleich Null ist. Zur Berechnung der Sprunghöhe  $\Delta C$  genügt es, bei der Differentiation nach  $T$  in (1.18) nur Abhängigkeiten der Form  $T - T_c$  zu berücksichtigen und sonst überall  $T = T_c$  zu setzen. Für  $T \leq T_c$  folgt

$$\begin{aligned} \Delta S/V &= -\partial f / \partial T \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\partial r}{\partial T} (\phi_0(T))^2 + \underbrace{\left( \frac{\partial f}{\partial \phi} \right)_{\phi_0}}_{=0} \frac{d\phi_0}{dT} \\ &= -\frac{r_0^2}{8T_c u} \frac{T_c - T}{T_c} \leq 0 \end{aligned} \quad (1.19)$$

Die Entropie verhält sich somit stetig bei  $T_c$ ; aufgrund einsetzender Ordnung ist  $\Delta S \leq 0$ . Schließlich folgt für den Sprung in der Wärmekapazität  $\Delta C = T_c (\partial \Delta S / \partial T)_{T_c}$  (vgl. Abb. (1.7))



**Abbildung 1.7:** Sprung in der Wärmekapazität bei  $T_c$ .

$$\Delta C/V = \frac{r_0^2}{8T_c u} \quad (1.20)$$

Das bisher Gesagte läßt sich ohne weiteres durch Mitnahme des zum Ordnungsparameter konjugierten Feldes  $h$  verallgemeinern; dabei ist  $f$  zu ersetzen durch

$$f_h = f - h \phi \quad (1.21)$$

Zwischen beobachtetem Ordnungsparameter, Feld und Temperatur besteht wegen  $\partial f_h / \partial \phi \equiv 0$  die Zustandsgleichung

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = h \quad (1.22)$$

Zunächst setzen wir  $T \neq T_c$  voraus und betrachten die Änderung des Ordnungsparameters gegenüber (1.17),  $\delta\phi = \phi - \phi_0$ , im Limes kleiner Felder  $h$ , so daß wir bzgl.  $h$  und  $\delta\phi$  linearisieren können. Gesucht ist also die lineare Systemantwort, ausgedrückt durch die Ordnungsparameter-Suszeptibilität  $\chi = \delta\phi/h$ , bzw.

$$\chi = \left( \frac{\partial \phi}{\partial h} \right)_{h=0} \quad (1.23)$$

Für  $T > T_c$  ( $\phi_0 = 0$ ) führt (1.23) für  $h \rightarrow 0$  sofort auf die Bedingung  $r\delta\phi - h = 0$ , d.h.  $\chi = r^{-1}$ . Explizit erhalten wir ein Curie-Weiß-Gesetz:

$$\chi = \frac{T_c}{r_0(T - T_c)}; \quad T > T_c \quad (1.24)$$

Eine einfache Rechnung für  $T < T_c$  liefert ebenfalls ein Curie–Weiß–Gesetz mit einer etwas geänderten Curie–Konstanten,

$$\chi = \frac{T_c}{2r_0(T_c - T)}; \quad T < T_c \quad (1.25)$$

Bei  $T = T_c$  divergiert die Suszeptibilität, da die Krümmung von  $\Delta F$  bei  $\phi = 0$  verschwindet. Zwischen Ordnungsparameter und äußerem Feld besteht jetzt kein linearer Zusammenhang. Vielmehr finden wir bei  $r = 0$  mit  $\partial f_h / \partial \phi = 4u\phi^3 - h = 0$ , sofort

$$\phi_0 = \left( \frac{h}{4u} \right)^{1/3} \quad (1.26)$$

Die Ausdrücke (1.24)–(1.26) definieren, wie der Vergleich mit (1.10) und (1.9) zeigt, die kritischen Exponenten  $\gamma$  und  $\delta$ . Zusammengefaßt liefert die Landau–Theorie die sog. *“klassischen Exponenten”*

$$\beta = 1/2, \quad \gamma = 1, \quad \alpha = 0, \quad \delta = 3 \quad (1.27)$$

Sie gelten nach dieser Theorie ganz allgemein, d. h. sie sind unabhängig von den Werten der Landau–Parameter, von der räumlichen Dimension  $d$  des Systems und vom Charakter des Ordnungsparameters. Dieselben Exponenten liefert die Molekularfeld–Theorie (§2.3). Jedoch weichen die experimentell gemessenen kritischen Exponenten hiervon zum Teil erheblich ab, vgl. § 1.1.

Das bisher skizzierte Vorgehen ist unmittelbar auch auf Systeme mit mehrkomponentigem Ordnungsparameter und Anisotropien verallgemeinerbar. Es sei  $\vec{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_n)$  ein  $n$ –komponentiger Vektor, und das System sei isotrop. Dann darf die Dichte der freien Energie nur von drehinvarianten Kombinationen der  $\phi_i$  abhängen (O(n)–Modell):

$$f = \frac{r}{2} \sum_{i=1}^n \phi_i^2 + u \left( \sum_{i=1}^n \phi_i^2 \right)^2 + \dots \quad (1.28)$$

Der Fall  $n = 2$  entspricht z.B. einem isotropen Supraleiter mit komplexem Ordnungsparameter  $\Phi$  ( $\phi_1 = \text{Re}\Phi$ ;  $\phi_2 = \text{Im}\Phi$ ), während der Fall  $n = 3$  bei einem isotropen Ferromagneten realisiert ist. In Gegenwart eines äußeren Feldes  $\vec{h}$  muß man für  $T < T_c$  dann die transversale von der longitudinalen Suszeptibilität unterscheiden, je nachdem ob  $\vec{h} \perp \vec{\phi}$  oder  $\vec{h} \parallel \vec{\phi}$ . Ist der Ordnungsparameter ein 3–komponentiger Vektor und liegt kubische Anisotropie vor, so ist die Landau–Entwicklung bis zu Termen 4. Ordnung gegeben durch

$$f = \frac{r}{2} \sum_{i=1}^3 \phi_i^2 + u \left( \sum_{i=1}^3 \phi_i^2 \right)^2 + v \sum_{i=1}^3 \phi_i^4 \quad (1.29)$$

mit  $u > 0$ ,  $|v| < u$ .

### Phasenübergänge 1. Art

Maßgebend für das Auftreten eines Phasenübergangs 1. Art ist ein Verlauf der Funktion  $f(\phi)$ , wie er in Abb. (1.8a) dargestellt ist. Die Übergangstemperatur  $T_0$  bestimmt sich aus der Bedingung, daß bei  $\phi = 0$  und bei einem Wert  $\phi_0 \neq 0$  entartete lokale Minima auftreten. Letzteres wird für  $T < T_0$  zum absoluten Minimum. Offensichtlich verhält sich nun der Ordnungsparameter  $\phi_0(T)$  bei  $T_0$  unstetig; sein Temperaturverlauf ist schematisch in Abb. (1.8b) dargestellt.

Ein Verhalten wie in Abb. (1.8a) wird z.B. durch den Ausdruck

$$f(\phi) = \frac{r}{2}\phi^2 + u\phi^4 + v\phi^6 \quad (1.30)$$

nachgebildet, mit  $r(T) = r_0(T - T^*)/T^*$ ;  $r_0 > 0$ ,  $u < 0$  und  $v > 0$ . Man rechnet leicht nach, daß die Übergangstemperatur  $T_0$  und der Sprung des Ordnungsparameters  $\phi(T_0)$  bestimmt sind durch

$$r(T_0) = \frac{u^2}{2v} \quad (1.31)$$

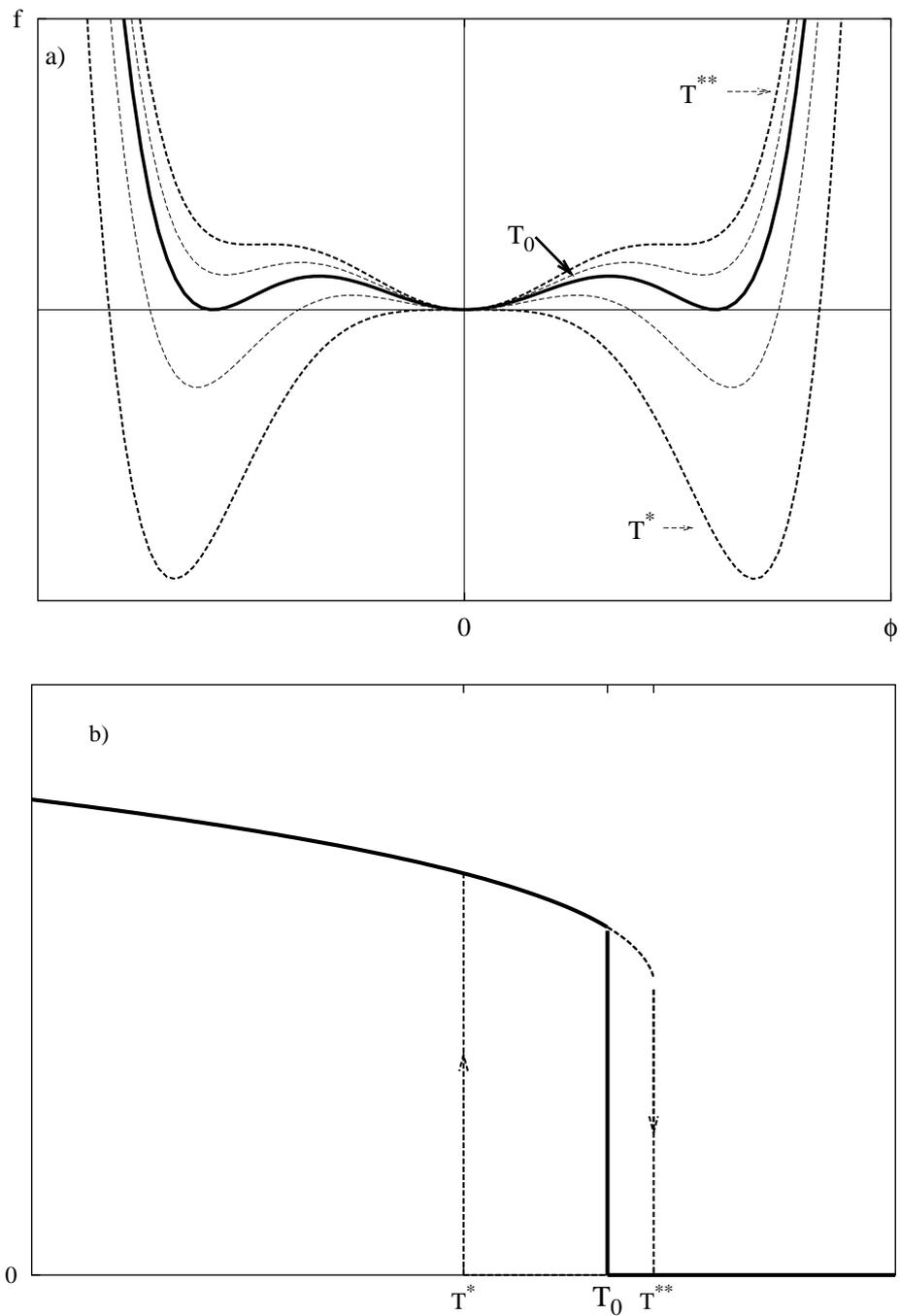
$$\phi(T_0) = \left(\frac{u}{2v}\right)^{1/2} \quad (1.32)$$

Zu beachten ist, daß  $T_0 > T^*$ , wobei  $T^*$  wie in (1.16) durch  $r(T^*) = 0$  gegeben ist. Im Temperaturbereich  $T^* < T < T_0$  ist die ungeordnete Phase ( $\phi = 0$ ) *metastabil*, d. h. sie ist wegen  $(\partial^2 f / \partial \phi^2)_{\phi=0} > 0$  stabil gegenüber hinreichend kleinen Änderungen von  $\phi$ , ohne aber dem absoluten Minimum von  $f(\phi)$  zu entsprechen. Dieses Verhalten legt die Vorstellung nahe, daß die ungeordnete Phase sich bis zur Temperatur  $T^*$  herab unterkühlen läßt. Denn bei derjenigen Temperatur, für die

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}\right)_{\phi=0} = 0 \quad (1.33)$$

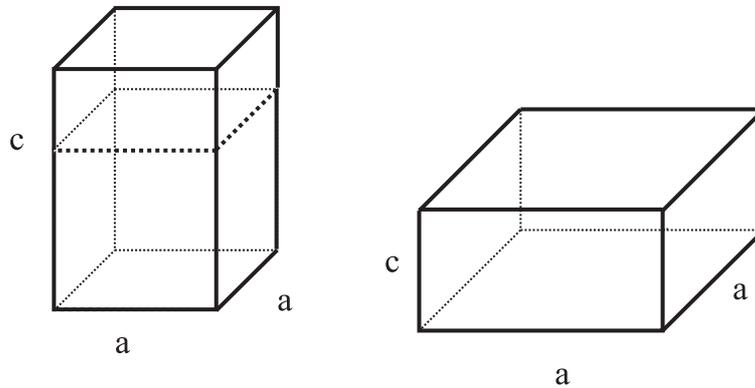
gilt, endet die lokale Stabilität der ungeordneten Phase. Im Zusammenhang mit Phasenübergängen 1. Art bezeichnet man  $T^*$  als die "spinodale Temperatur" der ungeordneten Phase. Analoge Überlegungen gelten hinsichtlich der Überhitzung der geordneten Phase.

Ein Phasenübergang 1. Art tritt auch dann auf, wenn anstelle von (1.30) die Dichte der freien Energie einen Term  $\propto \phi^3$  enthält,  $f(\phi) = \frac{r}{2}\phi^2 + w\phi^3 + u\phi^4$ , mit  $u > 0$ . Eine solche Form ist z.B. bei einem strukturellen Phasenübergang eines Kristalls zwischen einer kubischen Phase ( $T > T_0$ ) und einer tetragonalen Phase ( $T < T_0$ ) zu erwarten. Kennzeichnet nämlich  $\phi$  die Größe der tetragonalen Verzerrung, so ist klar, daß unterschiedliche Vorzeichen von  $\phi$  unterschiedlichen physikalischen Situationen entsprechen, vgl. Abb. (1.9). Folglich ist  $f(\phi) \neq f(-\phi)$ . Ein Term  $\propto w\phi^3$  in der Landau-Entwicklung von  $f$  ist deshalb von der Symmetrie her erlaubt. Das Vorzeichen von  $w$  regelt dabei, welcher der beiden in Abb. (1.9) gezeigten Fälle realisiert wird. Dieses einfache Beispiel weist schon darauf, daß auch in komplizierteren Fällen durch Betrachtung der Symmetrien beider Phasen auf die Form der Landau-Entwicklung



**Abbildung 1.8:** Phasenübergang 1. Ordnung mit der Übergangstemperatur  $T_0$ . a) Dichte der freien Energie in Abhängigkeit von  $\phi$  für verschiedene  $T$ . Bei  $T_0$  zeigt  $f(\phi)$  zwei entartete Minima. Das lokale Minimum von  $f(\phi)$  bei  $\phi = 0$  verschwindet mit abnehmender Temperatur bei der Unterkühlungstemperatur  $T^* < T_0$ . Analog verschwindet bei der Überhitzungstemperatur  $T^{**}$  das lokale Minimum bei  $\phi > 0$ . b) Temperaturverlauf des Ordnungsparameters.

und damit auf die Ordnung des Phasenübergangs geschlossen werden kann. Eine Systematik hierzu wird durch die Gruppentheorie ermöglicht.



**Abbildung 1.9:** Tetragonale Verzerrung eines kubischen Kristalls. Gezeigt sind die beiden Möglichkeiten  $c > a$  (“lange  $c$ -Achse”) und  $c < a$  (“kurze  $c$ -Achse”).

Grundsätzlich beschränkt sich die Landau–Theorie auf qualitative Aussagen der Art, wie sie oben diskutiert wurden. Offen bleibt die Frage einer quantitativen Abschätzung der Landau–Parameter für ein reales System oder für ein bestimmtes mikroskopisches Modell. Auf diese Frage kommen wir in § 2.3 zurück. Desweiteren bleibt festzuhalten, daß die Landau–Theorie nur von dem wahrscheinlichsten Wert des Ordnungsparameters, bestimmt durch das absolute Minimum der freien Energie, Gebrauch macht. Vernachlässigt werden Ordnungsparameter–Fluktuationen, die vor allem dann wichtig werden, wenn die “Rückstellkraft”  $(\partial^2 f / \partial \phi^2)_{\phi=0}$  nahezu verschwindet, vgl. § 2.5 und § 2.6.

# Kapitel 2

## Statistische Mechanik

### 2.1 Modellsysteme

Die Existenz verschiedener Phasen eines Stoffes aus den molekularen Wechselwirkungen heraus zu erklären, ist eine zentrale Fragestellung der Statistischen Mechanik. Bei den Untersuchungen spielen vereinfachte Modelle eine wichtige Rolle. Einerseits ermöglichen sie es, auf verhältnismäßig einfachem Wege die grundsätzlichen Phänomene qualitativ zu verstehen, vgl. §2.3. Andererseits können sehr oft quantitative Aussagen aus Computersimulationen mit vertretbarem Aufwand gewonnen werden. In Sonderfällen sind mathematisch exakte Ergebnisse bekannt. Im folgenden führen wir die einfachsten der gängigen Modellsysteme ein.

#### i) Ising–Modell

Jedem Punkt  $i$  eines regulären Gitters in  $d$  Dimensionen wird eine Variable  $\sigma_i = \pm 1$  (Ising–Spin) zugeordnet. Die Energie einer Spinkonfiguration  $\{\sigma_i\}$  ist gegeben durch den “Ising–Hamiltonian”

$$H\{\sigma_i\} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (2.1)$$

Der erste Term stellt eine Paar–Wechselwirkung zwischen Gitterplätzen  $i$  und  $j$  dar, ausgedrückt durch die Kopplungskonstanten  $J_{ij}$ ; der zweite Term beschreibt die Kopplung eines äußeren Feldes  $h$  an den Gesamtspin. Allgemeiner kann man auch ortsabhängige Felder  $h_i$  zulassen.

Stellt man sich unter  $\sigma_i = \pm 1$  die  $z$ –Komponente ( $\uparrow$  bzw.  $\downarrow$ ) eines Spins  $S = 1/2$  vor, der mit einem magnetischen Moment verbunden ist, so stellt (2.1) ein Modell für einen uniaxialen Magneten dar, bestehend aus wechselwirkenden lokalisierten Momenten mit zwei Einstellmöglichkeiten. In vielen Fällen beschränkt man sich auf Wechselwirkungen nur zwischen nächsten Nachbarn (NN),

$$J_{ij} = \begin{cases} J & i, j \text{ NN} \\ \text{falls} & \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.2)$$

Dann bedeutet  $J > 0$  “ferromagnetische” und  $J < 0$  “antiferromagnetische” Kopplung.

Die kanonische Zustandssumme für ein N–Spin–System ist gegeben durch

$$Z(T, h, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H\{\sigma_i\}} \quad (2.3)$$

Summiert wird über die  $2^N$  möglichen Spin–Konfigurationen. Die Berechnung von (2.3) im 1–dimensionalen Fall ( $d = 1$ ) kann z. B. mit der Transfermatrix–Methode durchgeführt werden. Für  $d = 2$  (Quadratgitter) und  $h = 0$  gelang Onsager (1944) im thermodynamischen Limes ( $N \rightarrow \infty$ ) die exakte Bestimmung des kritischen Punktes und von damit verbundenen singulären Eigenschaften. In  $d = 3$  ist man auch heute auf Näherungsmethoden angewiesen.

## ii) Gittergasmodell

Kennzeichnend für das Ising–Modell war die Annahme zweier Zustände pro Gitterplatz  $i$ . Verschiedene Interpretationen solcher Zustände sind möglich. Z. B. kann man Teilchen auf das Gitter verteilen mit der Einschränkung, daß ein bestimmter Gitterplatz entweder einfach besetzt ( $n_i = 1$ ) oder leer ist ( $n_i = 0$ ). Besteht zwischen den Teilchen eine Paar–Wechselwirkung  $W_{ij}$ , so hat die Energie  $H\{n_i\}$  einer Konfiguration von Besetzungszahlen  $\{n_i\}$  die Gestalt

$$H\{n_i\} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} W_{ij} n_i n_j - \mu \sum_i n_i \quad (2.4)$$

Zweckmäßigerweise wird in  $H$  noch ein Term proportional zum chemischen Potential  $\mu$  und der Gesamtteilchenzahl mit aufgenommen, so daß der (2.3) entsprechende Ausdruck die großkanonische Zustandssumme darstellt.

Solche “Gittergase” finden Anwendung z. B. auf Systeme von Punktdefekten in Festkörpern, feste Ionenleiter, Adsorbatsysteme oder auch bei der Beschreibung allgemeiner Eigenschaften von Flüssigkeiten in der Nähe ihres kritischen Punktes.

Werden die Besetzungszahlen  $n_i$  durch “Pseudospins”

$$\sigma_i = 2 n_i - 1 \quad (2.5)$$

ersetzt, so geht (2.4) bis auf eine additive Konstante in (2.1) über, mit

$$J_{ij} = -\frac{1}{4} W_{ij}; \quad h = \frac{\mu}{2} - \sum_j W_{ij} \quad (2.6)$$

Attraktive Wechselwirkungen im Gittergas,  $W_{ij} < 0$ , entsprechen ferromagnetischer Kopplung,  $J_{ij} > 0$ . Magnetische Phasen mit überwiegend  $\sigma_i = 1$  bzw.  $\sigma_i = -1$  entsprechen im Gittergas einer dichten Phase (“Flüssigkeit”) oder verdünnten Phase (“Gas”). Umgekehrt führen repulsive Wechselwirkungen,  $W_{ij} > 0$ , zu Phasenübergängen des Typs Ordnung–Unordnung; das magnetische Analogon geordneter Überstrukturen sind antiferromagnetische Phasen.

### iii) Binäre Legierungen

Metallische Legierungen zeigen oft eine Vielfalt verschiedener Phasen bei annähernd festem Grundgitter. Die atomaren Konfigurationen einer binären Legierung des Typs  $A_xB_{1-x}$  lassen sich durch Pseudospins  $\{\sigma_i\}$  darstellen, mit

$$\sigma_i = \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \end{Bmatrix} \Leftrightarrow \text{Gitterplatz } i \text{ besetzt durch } \begin{Bmatrix} A \\ B \end{Bmatrix} \text{ -Atom}$$

Wir nehmen an, daß zur Bestimmung der Energie  $H\{\sigma_i\}$  einer Konfiguration nur paarweise NN-Wechselwirkungen zu berücksichtigen sind und zwar je nach Typ der NN-Bindung:

$$\begin{Bmatrix} A-A \\ A-B \\ B-B \end{Bmatrix} \Leftrightarrow \text{Wechselwirkungsparameter } \begin{Bmatrix} V_{AA} \\ V_{AB} \\ V_{BB} \end{Bmatrix}$$

Offenbar ist die Energie ausdrückbar durch die Anzahl  $N_{AA}$  von  $(A-A)$ -Bindungen usw.,

$$H = N_{AA}V_{AA} + N_{AB}V_{AB} + N_{BB}V_{BB} \quad (2.7)$$

Bei gegebener Anzahl  $N_A, N_B$  von  $A$ - bzw.  $B$ -Atomen unterliegen die Größen  $N_{AA}, N_{AB}$  und  $N_{BB}$  den Nebenbedingungen

$$\begin{aligned} zN_A &= 2N_{AA} + N_{AB} \\ zN_B &= 2N_{BB} + N_{AB} \end{aligned} \quad (2.8)$$

$z$  ist die Koordinationszahl des Gitters,  $zN_A$  die Anzahl aller von  $A$ -Atomen ausgehenden Bindungen usw. Werden  $N_{AA}$  und  $N_{BB}$  eliminiert, so entsteht  $H = 2JN_{AB} + \frac{z}{2}(N_A V_{AA} + N_B V_{BB})$ . Dieser Ausdruck ist identisch mit dem Ising-Hamiltonian

$$H = \text{const.} - J \sum_{(NN)} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (2.9)$$

wenn

$$J = \frac{1}{2} \left( V_{AB} - \frac{V_{AA} + V_{BB}}{2} \right) \quad (2.10)$$

$$h = \frac{z}{2} (V_{BB} - V_{AA}) \quad (2.11)$$

In (2.9) bedeutet  $\sum_{NN}$  eine einfache Summation über NN-Paare  $(i, j)$ . Thermodynamische Eigenschaften zu festem  $N_A, N_B$ , demzufolge zu konstantem  $\sum_i \sigma_i = N_A - N_B$ , werden also nur durch die *eine* Kopplungskonstante  $J$  bestimmt. Die beiden möglichen Vorzeichen  $J > 0$  bzw.  $J < 0$  bedingen jeweils eine Tendenz zu Phasentrennung bzw. Überstrukturbildung.

iv) **Heisenberg–Modell**

Der Hamiltonoperator

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \vec{s}_i \vec{s}_j - \vec{h} \sum_i \vec{s}_i \quad (2.12)$$

beschreibt aus lokalisierten Momenten aufgebaute, *isotrope* magnetische Systeme.  $\vec{s}_i = (s_{ix}, s_{iy}, s_{iz})$  bezeichnet die Spinoperatoren am Ort  $i$ , mit den bekannten Drehimpuls–Vertauschungsrelationen  $[s_{ix}, s_{jy}] = \delta_{ij}(i\hbar s_{iz})$  usw., sowie  $(\vec{s}_i)^2 = \hbar^2 S(S+1)$ . Durch die Art des magnetischen Ions in der betreffenden Substanz ist die Größe des Spins  $S$  festgelegt. Anwendungen sind Verbindungen der Seltenen Erden, z.B. EuO.

Im Gegensatz zu i) bis iii) stellt (2.12) ein quantenmechanisches Modell dar. Quanteneffekte sind am stärksten ausgeprägt für Systeme  $S = 1/2$ ; für hinreichend große  $S$  gehen die  $\vec{s}_i$  in klassische Vektoren über (klassisches Heisenberg–Modell).

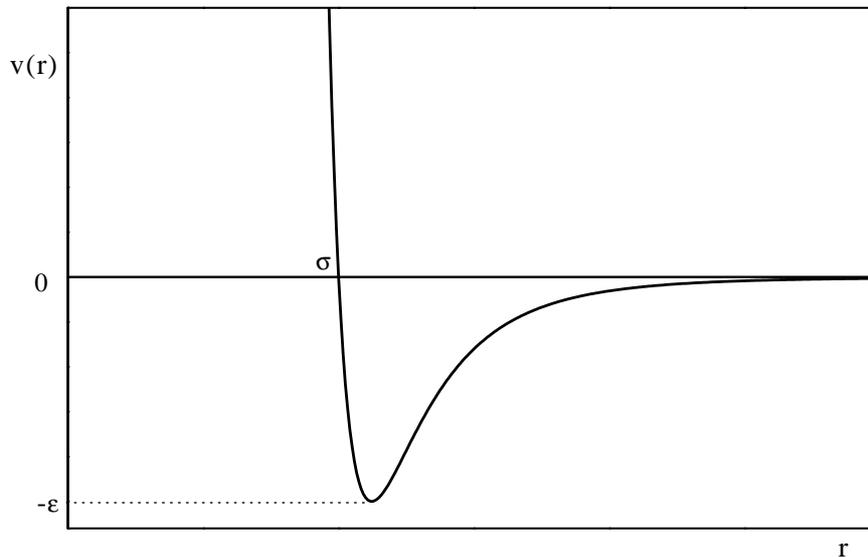
In Abwesenheit eines äußeren Feldes  $\vec{h} = 0$  vertauscht der Gesamtspin  $\vec{M} = \sum_i \vec{s}_i$  mit dem Hamilton–Operator:  $[H, \vec{M}] = 0$ . Darin drückt sich die Drehinvarianz des Systems aus. In einem ferromagnetisch geordneten Zustand mit  $\langle \vec{s}_i \rangle \neq 0$  ist die Rotationssymmetrie gebrochen. Die Brechung einer kontinuierlichen Symmetrie zieht allgemein die Existenz sogenannter “Goldstone–Anregungen” nach sich, mit der Eigenschaft, daß im langwelligen Limes ( $q \rightarrow 0$ ) ihre Dispersionsrelation die Bedingung  $\omega(q) \rightarrow 0$  erfüllt. Goldstone–Anregungen eines Heisenberg–Ferromagneten sind die Magnonen mit  $\omega(q) \sim q^2$  für  $q \rightarrow 0$ . Anschaulich gesprochen geht der Energieaufwand gegen Null, wenn in einer Magnon–Anregung die Orientierung der Magnetisierung räumlich nur sehr langsam verdreht wird. Näheres über Goldstone–Anregungen siehe D. Forster, “Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions” (W.A. Benjamin, 1975). Im Ising–Ferromagneten ist im Gegensatz dazu nur die diskrete Inversionssymmetrie gebrochen; es existieren keine derartigen Anregungen. Goldstone–Moden in kristallinen Festkörpern (Translationssymmetrie gebrochen) sind die Phononen mit  $\omega(q) \sim q$ .

Anwendungen auf den Magnetismus nichtmetallischer Materialien erfordern verschiedene Verallgemeinerungen des Heisenberg–Modells. Im anisotropen Heisenberg–Modell wechselwirken die  $x, y$ – und  $z$ –Komponenten der Spins mit unterschiedlichen Kopplungskonstanten  $J_j^x, J_j^y$  und  $J_j^z$ . Der Spezialfall  $J_j^x = J_j^y = 0$  führt auf das Ising–Modell, während der Fall  $J_j^z = 0, J_j^x = J_j^y$  das “XY–Modell” darstellt. Neben anisotropen Wechselwirkungen können auch Einzelionen–Anisotropien auftreten. Näheres vgl. K. Yosida, “Theory of Magnetism” (Springer–Verlag 1998).

v) **Klassische Flüssigkeiten**

Die “einfachen” Flüssigkeiten (flüssige Edelgase) werden gut durch die Hamilton–Funktion

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v(|\vec{R}_i - \vec{R}_j|) \quad (2.13)$$



**Abbildung 2.1:** Lennard–Jones–Potential in Abhängigkeit von  $r$  nach (2.14).  $\epsilon$  bezeichnet die Tiefe des Potentialminimums und  $\sigma$  die typische Ausdehnung der Elektronenhülle des Atoms.

mit einem Lennard–Jones–Potential beschrieben,

$$v(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) \quad (2.14)$$

Die Bedeutung der Parameter  $\epsilon$  und  $\sigma$  geht aus Abb. (2.1) hervor.

#### vi) **Quantenflüssigkeiten**

Im flüssigen Helium wird aufgrund der kleinen Masse der He–Atome die thermische De Broglie–Wellenlänge  $\lambda_{th}$  vergleichbar mit interatomaren Abständen. Man hat es deshalb mit einer Quantenflüssigkeit zu tun, für die ein Hamilton–Operator derselben Form wie (2.13) maßgeblich ist. Bei  ${}^4\text{He}$  tritt die Bose–Statistik hinzu, bei  ${}^3\text{He}$  die Fermi–Statistik. Aufwendige Quanten–Simulationen ermöglichen für die Bose–Systeme parameterfreie Aussagen zu den Gleichgewichtseigenschaften bei Temperaturen  $T \neq 0$ , insbesondere auch zum  $\lambda$ –Übergang (vgl. z. B. D.M. Ceperley, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995)). Im Gegensatz zu  ${}^4\text{He}$  treten superfluide Eigenschaften der Fermi–Flüssigkeit  ${}^3\text{He}$  erst im Millikelvin–Bereich auf.

Fermi–Flüssigkeiten mit attraktiver Wechselwirkung, z.B. Metallelektronen mit phonon–induzierter Attraktion, kondensieren in einen supraleitenden Zustand.

#### vii) **Ginzburg–Landau Modell**

Hinsichtlich derjenigen Eigenschaften, die unmittelbar mit dem Phasenübergang verknüpft sind, lassen sich viele mikroskopische Modelle auf das phänomenologisch angelegte Ginzburg–Landau Modell abbilden. Näheres s. § 2.5.

## 2.2 Thermodynamik und Fluktuationen

Maßgeblich zur Bestimmung aller thermodynamischen Eigenschaften eines Systems ist die kanonische Verteilung bzw. eine verallgemeinerte kanonische Verteilung. Das zentrale Problem besteht in der Berechnung der zugehörigen Zustandssumme  $Z$  und der freien Energie  $F = -k_B T \ln Z$ . Im allgemeinen interessiert im Zusammenhang mit Phasenübergängen hiervon nur der thermodynamische Limes.

Aussagen über Fluktuationen einer Observablen  $A$  erhält man nach folgendem Schema. Ist  $H$  der Hamilton-Operator des Systems, so bildet man

$$H_h = H - hA \quad (2.15)$$

durch Addition der “Störung”  $-hA$ . Der Parameter  $h$  spielt die Rolle des zu  $A$  konjugierten Feldes. Der Einfachheit halber setzen wir voraus, daß  $H$  und  $A$  kommutieren,  $[H, A] = 0$ . Dann kann man simultane Eigenzustände zu  $H$  und  $A$  einführen, die wir mit dem Index  $n$  durchnummerieren. Die zugehörigen Eigenwerte seien  $E_n$  und  $A_n$ . Die zum “gestörten” Hamilton-Operator  $H_h$  gehörende Zustandssumme hat somit die Form

$$Z(T, h) = \sum_n e^{-\beta(E_n - hA_n)} \quad (2.16)$$

Bei den klassischen Spinmodellen von §2.1 kennzeichnet  $n$  jeweils eine bestimmte Spin-konfiguration.

Durch wiederholte Differentiation nach  $h$  erkennt man, daß  $k_B T \ln Z(T, h) = -F_h$  erzeugende Funktion der Momente von  $A$  ist,

$$\frac{\partial F_h}{\partial h} = -\langle A \rangle_h \quad (2.17)$$

$$-\frac{\partial^2 F_h}{\partial h^2} = \frac{\partial \langle A \rangle_h}{\partial h} = \beta(\langle A^2 \rangle_h - \langle A \rangle_h^2) \quad (2.18)$$

Im Grenzfall  $h \rightarrow 0$  stellt die l.S. von (2.18) die zu  $A$  gehörende Nullfeld-Suszeptibilität dar. Die r.S. ist ein Maß für die Fluktuationen von  $A$  im ungestörten System.

Dieses Schema läßt sich verallgemeinern durch Addition mehrerer Observablen mit den jeweils dazugehörigen konjugierten Feldern. Wir demonstrieren dies am Beispiel des Ising-Modells in Gegenwart eines ortsabhängigen Feldes  $\mathbf{h} = \{h_i\}$ . Es sei

$$H_{\mathbf{h}} = H - \sum_i h_i \sigma_i \quad (2.19)$$

wobei  $H$  hier nur die Ising-Wechselwirkung darstellt. Analog zu (2.17) und (2.18) ergibt sich

$$\frac{\partial F_{\mathbf{h}}}{\partial h_i} = -\langle \sigma_i \rangle_{\mathbf{h}} \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial \langle \sigma_i \rangle_{\mathbf{h}}}{\partial h_j} = \beta (\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\mathbf{h}} - \langle \sigma_i \rangle_{\mathbf{h}} \langle \sigma_j \rangle_{\mathbf{h}}) \quad (2.21)$$

Dieser Ausdruck stellt im Grenzfall verschwindender Felder  $\mathbf{h} = 0$  die ortabhängige Spin-Suszeptibilität  $\chi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$  dar. Hierbei kennzeichnet  $\vec{R}_i$  den Ort des Gitterpunktes  $i$ . (Wir setzen ein reguläres Gitter voraus; die Funktion  $\chi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$  ist invariant gegenüber Gittertranslationen.)  $\chi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$  beschreibt die durch ein schwaches, ortsabhängiges Feld hervorgerufene lineare Abweichung  $\delta \langle \sigma_i \rangle_{\mathbf{h}} = \langle \sigma_i \rangle_{\mathbf{h}} - \langle \sigma \rangle$  vom ungestörten Mittelwert  $\langle \sigma \rangle$ , den wir als räumlich konstant annehmen. Im paramagnetischen Zustand gilt  $\langle \sigma \rangle = 0$ , im ferromagnetischen Zustand ist  $\langle \sigma \rangle$  die spontane Magnetisierung pro Spin. Definieren wir also

$$\begin{aligned} \delta \langle \sigma_i \rangle_{\mathbf{h}} &= \sum_j \left( \frac{\partial \langle \sigma_i \rangle_{\mathbf{h}}}{\partial h_j} \right)_{\mathbf{h}=0} h_j \\ &\equiv \sum_j \chi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) h_j \end{aligned} \quad (2.22)$$

so ist nach (2.21) die ortsabhängige Suszeptibilität durch die Spin-Korrelationsfunktion im ungestörten System ( $\mathbf{h} = 0$ ) bestimmt,

$$\boxed{\chi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \beta (\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma \rangle^2)} \quad (2.23)$$

Speziell für ein homogenes externes Feld  $h_j \equiv h$  erhält man ortsunabhängige Größen  $\delta \langle \sigma_i \rangle \equiv \delta \langle \sigma \rangle$ , mit

$$\delta \langle \sigma \rangle = \chi h \quad (2.24)$$

Die Suszeptibilität  $\chi$  geht dabei aus (2.23) durch Summation über alle  $i$  hervor,

$$\boxed{\chi = \beta \sum_j (\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma \rangle^2)}. \quad (2.25)$$

In der Nähe eines ferromagnetischen Phasenübergangs wird die Spin-Korrelationsfunktion langreichweitig, so daß  $\chi$  anwächst und am kritischen Punkt divergiert. (2.23) bzw. (2.25) stellt den statischen Limes des sogenannten *Fluktuations-Dissipations-Theorems* dar.

### Berechnung von Mittelwerten bei gebrochener Symmetrie

Das kanonische Mittel von  $\sigma_i$  im feldfreien Fall  $h = 0$  verschwindet offenbar,

$$\langle \sigma_i \rangle_{h=0}^{kan.} = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_k\}} \sigma_i \exp \left( \beta \sum_{k,l} J_{k,l} \sigma_k \sigma_l \right) = 0 \quad (2.26)$$

da sich jeder Term  $\{\sigma_k\}$  mit dem entsprechenden Term  $\{-\sigma_k\}$  bei der Summation weghebt. Die gleiche Aussage gilt auch für das Heisenbergmodell aufgrund dessen Drehinvarianz. Das übliche kanonische Mittel kann daher keine spontane Magnetisierung

liefern. Die Ursache ist einfach zu übersehen. Betrachten wir die Verteilungsfunktion  $P(M)$  der Gesamtmagnetisierung  $M = \sum_i \sigma_i$  im kanonischen Ensemble, die für  $h = 0$  natürlich symmetrisch ist,  $P(M) = P(-M)$ . Für  $T > T_c$  erhält man für ein System mit  $N \gg 1$  Spins annähernd eine Gauß-Verteilung mit Mittelwert  $\langle M \rangle = 0$  und mittlerer quadratischer Abweichung  $k_B T N \chi$ ; dabei ist  $\chi$  wie in (2.25) die Suszeptibilität pro Spin. Geht man zu Temperaturen  $T < T_c$  über, so äußert sich der Phasenübergang in einer “Doppelpeakstruktur” in  $P(M)$  mit Maxima gleichen Gewichts bei  $\pm M_{spontan}$  und entsprechenden Halbwertsbreiten. Das kanonische Ensemble enthält also gleichgewichtig *beide* ferromagnetische Phasen. (In der Umgebung von  $T_c$  wachsen  $\chi$  und somit die Peakbreiten an; es findet ein “glatter” Übergang vom einfachen Peak zum Doppelpeak statt.)

Um eine Phase auszusondern, wird ein kleines Feld  $h$  eingeschaltet. Für  $N \gg 1$  wächst in der  $h$ -abhängigen Verteilungsfunktion  $P_h(M)$  das Gewicht der bevorzugten Phase relativ zur unterdrückten Phase an, etwa wie  $\exp(hN/k_B T)$ . Die spontane Magnetisierung erhält man also durch

$$\langle \sigma_i \rangle_{spontan} = \lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle_h^{kan.} \quad (2.27)$$

Unter dieser Reihenfolge der Grenzwertbildung überlebt nur die bevorzugte Phase. Dieses Vorgehen entspricht der experimentellen Situation, in der kleine Störungen von außen die Orientierung der spontanen Magnetisierung festlegen.

(2.27) kennzeichnet grundsätzlich eine als Ordnungsparameter geeignete Observable. Aus Symmetriegründen verschwindet ihr Mittelwert in der Hochtemperaturphase. Führt man jedoch ein symmetriebrechendes Feld  $h$  ein, so daß *nach* Übergang zum thermodynamischen Limes für  $h \rightarrow 0$  ein nichtverschwindender Mittelwert überlebt, so hat man eine neue Phase mit “gebrochener Symmetrie” identifiziert. Alternativ kann man im Prinzip auch die räumliche Korrelationsfunktion einer Observablen untersuchen und feststellen, ob langreichweitige Ordnung im Sinne eines nichtverschwindenden Grenzwerts bei großen Abständen vorliegt.

## 2.3 Molekularfeld–Approximation (MFA)

Molekularfeld–Naherungen konnen verschiedenartig formuliert werden. Die Idee einer *optimalen 1–Teilchen Naherung* fuhrt auf die Formulierung der MFA als Variationsverfahren. Um die Darstellung moglichst allgemein zu halten, leiten wir zuerst die Gibbs–Bogoljubov–Ungleichung her. Dabei stutzen wir uns auf das grundlegende Extremalprinzip der Statistischen Mechanik.

Fur zwei statistische Operatoren  $\rho$  ( $\rho$  positiv;  $\rho = \rho^+$ ;  $\text{Sp } \rho = 1$ ) und  $\rho'$  beweisen wir zunachst die folgende Ungleichung:

$$\text{Sp } \rho'(\ln \rho - \ln \rho') \leq 0 \quad (2.28)$$

Das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn  $\rho = \rho'$ .

Zum Beweis geht man aus von der Ungleichung

$$\ln x \leq x - 1 \quad (2.29)$$

die in Abb. (2.2) veranschaulicht ist. Hier gilt das Gleichheitszeichen genau dann, wenn  $x = 1$ . In den jeweiligen Eigendarstellungen haben die Operatoren  $\rho'$  und  $\rho$  die Form  $\rho' = \sum_n p'_n |n\rangle\langle n|$ ;  $\rho = \sum_M p_M |M\rangle\langle M|$ , mit  $p'_n > 0$ ;  $p_M > 0$ ;  $\sum_n p'_n = \sum_M p_M = 1$ . Somit ist  $\ln \rho = \sum_M \ln p_M |M\rangle\langle M|$ . Damit geht die l.S. von (2.28) uber in

$$\begin{aligned} \sum_n p'_n \left( \sum_M \ln p_M |\langle n|M\rangle|^2 - \ln p'_n \right) &= \sum_M \left( \sum_n p'_n \ln \frac{p_M}{p'_n} \right) |\langle n|M\rangle|^2 \leq \\ &\leq \sum_M \sum_n p'_n \left( \frac{p_M}{p'_n} - 1 \right) |\langle n|M\rangle|^2 = \sum_M \sum_n (p_M - p'_n) |\langle n|M\rangle|^2 = \text{Sp } \rho - \text{Sp } \rho' = 0 \end{aligned}$$

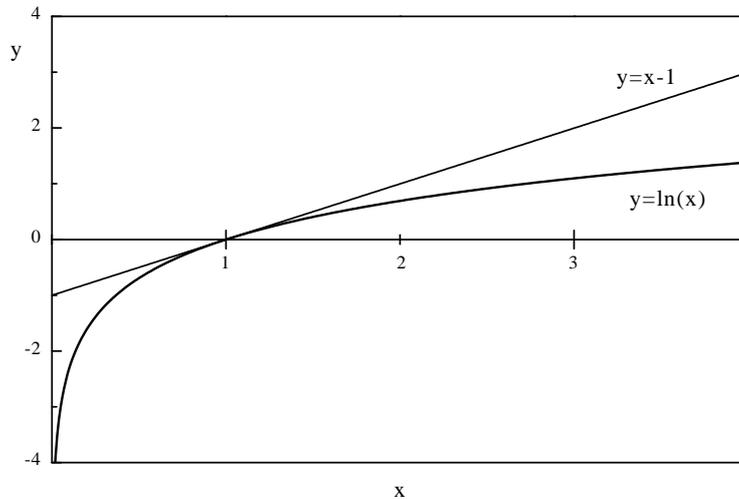


Abbildung 2.2: Illustration der Ungleichung (2.29)

Dabei haben wir  $x = p_M/p'_n$  gesetzt und im letzten Schritt  $\text{Sp } \rho = \text{Sp } \rho' = 1$  verwendet.

Zum Hamilton-Operator  $H$  eines physikalischen Systems definieren wir nun eine verallgemeinerte freie Energie als Funktional eines beliebigen statistischen Operators  $\rho'$ ,

$$F[\rho'] \equiv \text{Sp } \rho'(H + k_B T \ln \rho') \quad (2.30)$$

Der 1. Term stellt den Mittelwert der Energie dar (“innere Energie”), der 2. Term ist die zum Operator  $\rho'$  gehörende Informationsentropie  $S[\rho'] = -k_B \sum_n p'_n \ln p'_n$ , multipliziert mit  $(-T)$ . Setzt man speziell den auf  $H$  bezogenen statistischen Operator eines kanonischen Ensembles

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}; \quad Z = \text{Sp } e^{-\beta H} \quad (2.31)$$

in (2.30) ein, so entsteht

$$\begin{aligned} F[\rho] &= \text{Sp } \rho[H - k_B T(\ln Z + \beta H)] \\ &= -k_B T \ln Z \equiv F \end{aligned} \quad (2.32)$$

Die verallgemeinerte freie Energie mit dem Argument (2.31) ist also gleich der thermodynamischen freien Energie  $F$  des Systems.

Es sei nun  $\rho'$  ein beliebiger statistischer Operator. Aus der Ungleichung (2.28) folgt sofort  $F[\rho'] \geq \text{Sp } \rho' H + k_B T \text{Sp } \rho' \ln \rho = \text{Sp } \rho' H + k_B T \text{Sp } \rho'(-\ln Z - \beta H)$  oder

$$\boxed{F[\rho] \leq F[\rho']} \quad (2.33)$$

Die verallgemeinerte freie Energie als Funktional von  $\rho'$  nimmt demnach bei der kanonischen Verteilung ihr absolutes Minimum ein und ist dort gleich der thermodynamischen freien Energie. Mit anderen Worten: bei gegebener Temperatur  $T$  ist das thermodynamische Gleichgewicht gerade durch das absolute Minimum von (2.30) charakterisiert.

Es sei  $H_0$  ein “Test-Hamilton-Operator”, mit dem  $H$  approximiert werden soll. Den zu  $H_0$  gehörenden kanonischen statistischen Operator und die zugehörige freie Energie bezeichnen wir mit  $\rho_0$ , bzw.  $F_0$ . Nach (2.33) gilt  $F \leq F[\rho_0] = \langle H + k_B T \ln \rho_0 \rangle_0$ , wobei die Abkürzung  $\langle \dots \rangle_0 \equiv \text{Sp } \rho_0 \dots$  benutzt wird. Nach Subtraktion und Addition eines Terms  $\langle H_0 \rangle_0$  erhalten wir die Gibbs-Bogoljubov-Ungleichung

$$\boxed{F \leq \langle H - H_0 \rangle_0 + F_0} \quad (2.34)$$

In der praktischen Auswertung wählt man für  $H_0$  eine “lösbare” Form, die jedoch von freien Variationsparametern abhängt. Minimierung der r.S. von (2.34) nach diesen Parametern führt dann auf die beste Approximation von  $F$  im Rahmen des gewählten Ansatzes. Bei  $T = 0$  geht  $F$  in die exakte Grundzustandsenergie  $E$  des Systems über,  $F = E$  und  $\langle H_0 \rangle_0 = F_0$ . Somit entsteht die Ungleichung  $E \leq \langle H \rangle_0$ , die mit dem Rayleigh-Ritz’schen Variationsverfahren für den Grundzustand identisch ist.

## Anwendung auf das Ising-Modell

Es sei

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i \quad (2.35)$$

mit ortsabhängigem externen Feld  $h_i$ . Als Test-Hamiltonian wählen wir ein System nichtwechselwirkender Spins,

$$H_0 = - \sum_i h_i^{eff} \sigma_i \quad (2.36)$$

mit den Größen  $h_i^{eff}$  als Variationsparameter. Zustandssumme und freie Energie zu  $H_0$  sind gegeben durch

$$Z_0 = \prod_i \left( e^{\beta h_i^{eff}} + e^{-\beta h_i^{eff}} \right) = \prod_i (2 \cosh \beta h_i^{eff}) \quad (2.37)$$

und

$$F_0 = -k_B T \sum_i \ln(2 \cosh \beta h_i^{eff}) \quad (2.38)$$

Außerdem haben wir

$$\langle \sigma_i \rangle_0 = -\frac{\partial F_0}{\partial h_i^{eff}} = \tanh \beta h_i^{eff} \quad (2.39)$$

Um (2.34) auszuwerten, benötigen wir  $\langle H_0 \rangle_0 = \sum_i h_i^{eff} \langle \sigma_i \rangle_0$  sowie  $\langle H \rangle_0$ . Da  $H_0$  unabhängige Spins beschreibt, faktorisiert die Korrelationsfunktion  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 = \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0$ , so daß

$$\langle H \rangle_0 = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 - \sum_i h_i \langle \sigma_i \rangle_0 \quad (2.40)$$

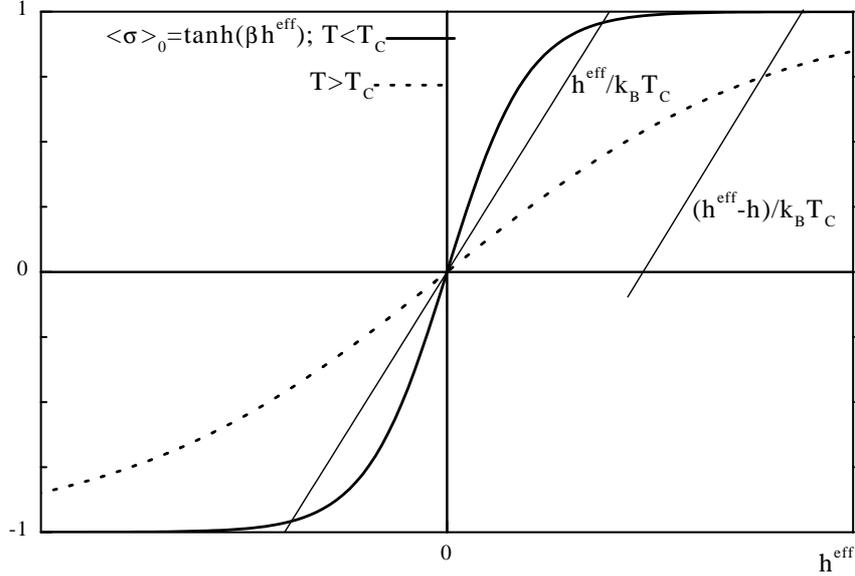
Zur Minimierung der r.S. von (2.34) wird

$$\frac{\partial}{\partial h_i^{eff}} (\langle H - H_0 \rangle_0 + F_0) = 0 \quad (2.41)$$

gesetzt. Eine einfache Rechnung unter Verwendung von (2.39) ergibt

$$\boxed{h_i^{eff} = h_i + \sum_j J_{ij} \langle \sigma_j \rangle_0 \quad \text{mit} \quad \langle \sigma_i \rangle_0 = \tanh \beta h_i^{eff}} \quad (2.42)$$

Dies sind die Selbstkonsistenzgleichungen der MF-Theorie. Die optimale Näherung unabhängiger Spins besteht darin, daß auf den  $i$ -ten Spin das effektive Feld  $h_i^{eff}$  wirkt, welches sich aus dem externen Feld und dem mittleren, durch die Wechselwirkung bedingten Einfluß der Spins in der Umgebung des  $i$ -ten Spins zusammensetzt. Für



**Abbildung 2.3:** Graphisch ermittelte Lösung von (2.43). Im Fall  $T < T_c$  ergibt sich für  $h = 0$  eine nichttriviale Lösung  $\langle \sigma \rangle_0 \neq 0$ .

ein ortsunabhängiges äußeres Feld  $h_i = h$  und unter der Annahme, daß sich unter der Wechselwirkung  $J_{ij}$  ein homogen geordneter Zustand ausbildet (siehe jedoch (2.53)) reduziert sich (2.42) auf  $i$ -unabhängige Größen  $h^{\text{eff}}$  und  $\langle \sigma \rangle_0$ . Diese sind bestimmt durch die Gleichung

$$\frac{h^{\text{eff}} - h}{\sum_j J_{ij}} = \tanh \beta h^{\text{eff}} \quad (2.43)$$

deren graphische Diskussion in Abb. (2.3) dargestellt ist. Die kritische Temperatur ist bestimmt durch

$$k_B T_c = \sum_j J_{ij} \quad (2.44)$$

Bei  $NN$ -Wechselwirkung ist die r.S. einfach gleich  $zJ$ , wobei  $z$  die Anzahl der nächsten Nachbarn angibt. Durch Entwicklung von (2.43) in der Nähe von  $T_c$  finden wir für die spontane Magnetisierung pro Spin

$$\langle \sigma \rangle_0 \simeq \sqrt{3(T_c - T)/T_c} \quad (2.45)$$

und die Suszeptibilität  $\chi = \lim_{h \rightarrow 0} \delta \langle \sigma \rangle_0 / h$ ,

$$\chi = \begin{cases} (k_B(T - T_c))^{-1} & T > T_c \\ (2k_B(T_c - T))^{-1} & T < T_c \end{cases} \quad \text{für} \quad (2.46)$$

Grundsätzlich liefern MF-Theorien stets die klassischen kritischen Exponenten  $\beta = 1/2$  und  $\gamma = \gamma' = 1$ . Man erkennt an der Herleitung auch, daß die Dimension des Systems an keiner Stelle entscheidend eingeht.

**$\vec{q}$ -abhängige Suszeptibilität und Spin-Korrelationsfunktion.**

Wir beschränken uns auf  $T > T_c$  und betrachten ein hinreichend schwaches, ortsabhängiges äußeres Feld  $h_i$ . Ziel ist die Berechnung der linearen Systemantwort  $\langle \sigma_i \rangle$  bzgl. der “Störung”  $h_i$  (“linear response”). Zur Vereinfachung der Notation wird der Index “0” zur Kennzeichnung von MF-Mittelwerten hier und im folgenden weggelassen. Unter der Annahme periodischer Randbedingungen für das Gitter wird  $h_i$  in Fourier-Komponenten zerlegt. Wegen der Linearität des Problems genügt es, lediglich *eine* Fourier-Komponente zu betrachten und gegebenenfalls am Ende der Rechnung verschiedene Fourier-Komponenten zu superponieren.

Es sei also

$$h_i = h(\vec{q})e^{i\vec{q}\vec{R}_i} + c.c. \quad (2.47)$$

Die Fourier-Komponenten  $h^{eff}(\vec{q})$  und  $\sigma(\vec{q})$  der Größen  $h_i^{eff}$  bzw.  $\langle \sigma_i \rangle$  sind in analoger Weise definiert. Aus der linearisierten Selbstkonsistenzgleichung (2.42) erhalten wir

$$h^{eff}(\vec{q}) = h(\vec{q}) + J(\vec{q})\sigma(\vec{q}), \quad \sigma(\vec{q}) = \beta h^{eff}(\vec{q}) \quad (2.48)$$

wobei mit  $J_{ij} \equiv J(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$

$$J(\vec{q}) = \sum_j J(\vec{R}_i - \vec{R}_j) e^{-i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \quad (2.49)$$

Bei NN-Wechselwirkung auf einem einfach kubischen  $3d$  Gitter mit der Gitterkonstanten  $a$  ist

$$J(\vec{q}) = 2J(\cos aq_x + \cos aq_y + \cos aq_z) \quad (2.50)$$

Aus (2.48) läßt sich nach Elimination von  $h^{eff}(\vec{q})$  die vom Wellenvektor  $\vec{q}$  abhängige Suszeptibilität  $\chi(\vec{q})$  ablesen,

$$\sigma(\vec{q}) = \chi(\vec{q})h(\vec{q}) \quad (2.51)$$

wobei

$$\chi(\vec{q}) = \frac{\beta}{1 - \beta J(\vec{q})} \quad (2.52)$$

Mit abnehmender Temperatur wächst  $\chi(\vec{q})$  und divergiert schließlich bei demjenigen Wellenvektor  $\vec{q}_{max}$ , für den  $J(\vec{q}) = max$ . Durch die Divergenz von  $\chi(\vec{q})$  bei  $\vec{q}_{max}$  ist die kritische Temperatur festgelegt

$$kT_c = J(\vec{q}_{max}) \quad (2.53)$$

Bei dieser Temperatur ist das System, wie aus (2.51) ersichtlich, instabil gegenüber der Ausbildung einer Spindichte mit Wellenvektor  $\vec{q}_{max}$ . Liegt das Maximum von  $J(\vec{q})$  bei  $\vec{q}_{max} = 0$ , so entsteht ferromagnetische Ordnung. Wegen  $J(0) = \sum_j J_{ij}$  stimmt (2.53) dann mit (2.44) überein. Dieser Fall trifft z. B. auf (2.49) mit  $J > 0$  zu; ist hingegen  $J < 0$  so folgt  $\vec{q}_{max} = \frac{\pi}{a}(1, 1, 1)$ , und man erhält Antiferromagnetismus mit einer  $(1, 1, 1)$ -Überstruktur. Bei komplizierteren Wechselwirkungen mit  $\vec{q}_{max}$  an einer beliebigen Stelle in der 1. Brillouin-Zone tritt eine entsprechend modulierte magnetische Phase auf.

Der Gedanke, bei Phasenübergängen 2. Art aus der Divergenz der Suszeptibilität in der ungeordneten Phase auf die kritische Temperatur und die Struktur der geordneten Phase zu schließen, gilt unabhängig von der MFA. Ob tatsächlich ein Phasenübergang 2. Art vorliegt, muß jedoch gesondert untersucht werden.

Mit Hilfe von (2.52) und des allgemeinen Ergebnisses (2.23),  $\chi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \beta \langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ , kann die Spin-Korrelationsfunktion im Ortsraum ( $d = 3$ ) berechnet werden,

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= k_B T \frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \in BZ} \chi(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \\ &= a^3 \int_{BZ} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}}{1 - \beta J(\vec{q})} \end{aligned} \quad (2.54)$$

$N$  bezeichnet die Anzahl der Gitterpunkte im Periodizitätsvolumen und  $a$  die Gitterkonstante. Bei großen Abständen  $|\vec{R}_i - \vec{R}_j|$  wird das Integral nur durch das Verhalten von  $\chi(\vec{q})$  für kleine  $q$  bestimmt. Im ferromagnetischen Fall entwickeln wir also

$$J(\vec{q}) = J(0)(1 - \xi_0^2 q^2 + O(q^4)) \quad (2.55)$$

wobei  $\xi_0$  als Reichweite der Wechselwirkung interpretiert werden kann,

$$\xi_0^2 = -\frac{1}{J(0)} \left( \frac{\partial^2 J(\vec{q})}{\partial \vec{q}^2} \right)_{\vec{q}=0} = \frac{\sum_i J(\vec{R}_i) \vec{R}_i^2}{\sum_i J(\vec{R}_i)} \quad (2.56)$$

Dann ergibt sich

$$\chi(\vec{q}) \simeq \frac{1}{k_B(T - T_c)} \frac{1}{1 + (q\xi)^2} \quad (2.57)$$

mit der *Korrelationslänge*

$$\xi = \xi_0 \left( \frac{T_c}{T - T_c} \right)^{1/2} \quad (2.58)$$

Nach dieser Entwicklung bzgl.  $q$  sind die Ausdrücke (2.57) und (2.58) identisch mit den Ergebnissen der in §2.5 beschriebenen Ginzburg-Landau-Theorie. Dort werden wir die Ortsabhängigkeit der Korrelationsfunktion näher diskutieren. Insbesondere folgt durch Einsetzen von (2.57) in (2.54), siehe § 2.5,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \simeq \frac{a^3 T}{4\pi \xi_0^2 T_c} \frac{1}{x_{ij}} e^{-x_{ij}/\xi} \quad (2.59)$$

für  $x_{ij} \equiv |\vec{R}_i - \vec{R}_j| \gg \xi_0$ . Die Reichweite  $\xi$  der Korrelationen divergiert für  $T \rightarrow T_c$  nach der MF-Theorie mit dem klassischen Exponenten  $\nu = 1/2$ .

### Freie Energie

In Verbindung mit (2.35) und (2.36) stellt das Minimum der r.S. von (2.34) bzgl.  $h_i^{eff}$  die freie Energie im Rahmen der MFA dar,

$$F_{\mathbf{h}} = \min(\langle H - H_0 \rangle_0 + F_0) \quad (2.60)$$

Wir fügen an dieser Stelle den Index  $\mathbf{h}$  hinzu, um klarzustellen, daß es sich um ein von den äußeren Feldern abhängiges thermodynamisches Potential handelt. Wegen (2.40) und (2.42) erhalten wir

$$F_{\mathbf{h}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 - k_B T \sum_i \ln(2 \cosh \beta h_i^{eff}) \quad (2.61)$$

Dabei sind  $h_i^{eff}$  und  $\langle \sigma_i \rangle$  Lösungen der Selbstkonsistenzgleichung (2.42).

Durch Legendre-Transformation können wir zu einer "intrinsischen" freien Energie  $F = F(\{\sigma_i\})$  übergehen, welche nicht von den äußeren Feldern, sondern von den inneren Variablen  $\langle \sigma_i \rangle$  abhängt,

$$F = F_{\mathbf{h}} + \sum_i h_i \langle \sigma_i \rangle \quad (2.62)$$

Die in  $F_{\mathbf{h}}$  enthaltene Wechselwirkung des Systems mit dem äußeren Feld wird in (2.62) also wieder subtrahiert. Gleichzeitig ist  $\{h_i\}$  zugunsten von  $\{\langle \sigma_i \rangle\}$  gemäß

$$\langle \sigma_i \rangle = -\partial F_{\mathbf{h}} / \partial h_i \quad (2.63)$$

zu eliminieren. Eine etwas längere, aber unschwierige Rechnung führt für den Fall eines Ferromagneten auf

$$F(\{\sigma_i\}) = -\frac{k_B T_c}{2} \sum_i \langle \sigma_i \rangle^2 + k_B T \sum_i \sum_{\pm} \frac{1 \pm \langle \sigma_i \rangle}{2} \ln \frac{1 \pm \langle \sigma_i \rangle}{2} + \frac{1}{4} \sum_{ij} J_{ij} (\langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma_j \rangle)^2 \quad (2.64)$$

Bei  $\langle \sigma_i \rangle = const.$  ist dieser Ausdruck identisch mit dem Ergebnis der Bragg-Williams-Theorie für die freie Energie, bestehend aus einem Mittelwert der inneren Energie und der Mischungsentropie unabhängiger Spins. Hinzu tritt in (2.64) ein Term aufgrund der Ortsabhängigkeit der  $\langle \sigma_i \rangle$ 's, wodurch offensichtlich die freie Energie erhöht wird. (2.64) läßt sich für  $T$  nahe  $T_c$  vereinfachen, wenn nach kleinen Mittelwerten  $\langle \sigma_i \rangle$  gemäß

$$\sum_{\pm} (1 \pm x) \ln(1 \pm x) = x^2 + \frac{x^4}{16} + O(x^6) \quad (2.65)$$

entwickelt wird. Außerdem setzen wir eine langsame örtliche Veränderung der  $\langle \sigma_i \rangle$  voraus, so daß wir gemäß

$$\langle \sigma_i \rangle \equiv \langle \sigma(\vec{R}_i) \rangle \rightarrow \sigma(\vec{x}) \quad (2.66)$$

$$\sum_j J_{ij} (\langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma_j \rangle)^2 \simeq 2Ja^2 (\vec{\nabla} \sigma(\vec{x}))^2 \quad (2.67)$$

$$a^3 \sum_i \dots \rightarrow \int d^3x \dots \quad (2.68)$$

zum Kontinuumsgrenzfall übergehen können. Das Endergebnis ist eine intrinsische freie Energie als Funktional von  $\sigma(\vec{x})$  folgender Form

$$F[\sigma(\vec{x})] - F[0] = \int d^3x \left[ \frac{r}{2} (\sigma(\vec{x}))^2 + u (\sigma(\vec{x}))^4 + \frac{\kappa}{2} (\vec{\nabla} \sigma)^2 \right] \quad (2.69)$$

mit

$$r = k_B(T - T_c)/a^3 \quad (2.70)$$

$$u = k_B T_c / 12a^3 \quad (2.71)$$

$$\kappa = J/a \quad (2.72)$$

Damit haben wir im Rahmen der MFA ein Ginzburg–Landau–Funktional, vgl. §2.5, für das Ising–Modell hergeleitet.

## 2.4 Thermodynamik binärer Mischungen

Wie in §2.1 ausgeführt, lassen sich die atomaren Konfigurationen binärer  $A - B$ -Legierungen auf einem festen Substratgitter durch einen Ising-Hamiltonian beschreiben. In diesem Abschnitt diskutieren wir die thermodynamischen Eigenschaften, wenn  $A$ - und  $B$ -Atome de facto sich gegenseitig abstoßen, genauer, wenn  $J = \frac{1}{2}(V_{AB} - (V_{AA} + V_{BB})/2) > 0$ . Ein Beispiel ist das Cu-Zn-System. Abb. (2.4c) zeigt das typische Phasendiagramm. Oberhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  sind  $A$ - und  $B$ -Atome in beliebigem Verhältnis mischbar, während für  $T < T_c$  eine Mischungslücke auftritt. Wird z.B. durch rasches Abkühlen ein Zustand innerhalb der *Mischungslücke* präpariert, so tritt Trennung in zwei Phasen unterschiedlicher Zusammensetzung ein, deren Mengenverhältnis durch die konstanten Teilchenzahlen  $N_A$  und  $N_B$  für die  $A$ - bzw.  $B$ -Atome festgelegt ist. Man beachte, daß in einem magnetischen System hingegen beliebige Spinflips erlaubt sind; hier gibt es keinen Erhaltungssatz für die Anzahlen  $N_\uparrow$  und  $N_\downarrow$  für "Up"- und "Down"-Spins.

Das Mischungsverhältnis von  $A$ - und  $B$ -Atomen in einer Phase der Zusammensetzung  $A_x B_{1-x}$  mit  $0 \leq x \leq 1$  charakterisieren wir durch die Konzentrationsvariable

$$c = 2x - 1 = \frac{N_A - N_B}{N_A + N_B}, \quad (2.73)$$

so daß  $-1 \leq c \leq +1$ . Offenbar ist  $c$  identisch mit dem Mittelwert des Pseudospins in (2.9),  $c \equiv \langle \sigma \rangle$ . Als Modell für die freie Energie pro Atom einer homogenen Phase,  $F/N = f(T, c)$ , verwenden wir den MFA-Ausdruck

$$f(T, c) = -\frac{k_B T_c}{2} c^2 - hc + k_B T \sum_{\pm} \frac{1 \pm c}{2} \ln \frac{1 \pm c}{2}, \quad (2.74)$$

der sich aus (2.64) ableitet. Die ersten beiden Terme stellen die innere Energie dar, mit  $k_B T_c = zJ$ ,  $h = \frac{z}{2}(V_{AA} - V_{BB})$ , vgl. (2.11), während in den letzten Term die Entropie eingeht. Den Verlauf von  $f(T, c)$  in Abhängigkeit von der Konzentration  $c$  zeigt Abb. (2.4a) für zwei Temperaturen oberhalb bzw. unterhalb  $T_c$ . Bei  $T > T_c$  gilt  $\partial^2 f / \partial c^2 > 0$  für *alle*  $c$ ; die Funktion  $f(T, c)$  ist bezüglich ihrer  $c$ -Abhängigkeit konvex. Mit abnehmender Temperatur wird diese Ungleichung *am* kritischen Punkt erstmals verletzt:  $(\partial^2 f / \partial c^2)_{c=0, T=T_c} = 0$ . Die Verletzung der Konvexität bei Temperaturen  $T < T_c$  erstreckt sich auf einen Bereich  $c_1 < c < c_2$ , wobei  $c_1$  und  $c_2$  durch die Berührungspunkte einer gemeinsamen Tangente bestimmt sind. Diese Punkte schließen einen schmalen Bereich ein mit  $\partial^2 f / \partial c^2 \leq 0$ , den sogenannten *spinodalen Konzentrationsbereich*  $c_{1sp} < c < c_{2sp}$ , wobei  $c_{1sp}$  und  $c_{2sp}$  die Wendepunkte markieren. Ausgehend von einer homogenen Phase der Konzentration  $c$  mit  $c_1 < c < c_2$  erkennt man bereits, daß die gesamte freie Energie erniedrigt werden kann, indem das System in zwei getrennte Phasen mit unterschiedlichen Konzentrationen aufbricht. Die Bestimmung der Konzentrationen zweier koexistierenden Phasen  $c_1$  und  $c_2$  aus den Berührungspunkten der gemeinsamen Tangente bezeichnet man als *Maxwell-Konstruktion*. Die Ersetzung von  $f(T, c)$  durch den Tangentenabschnitt im Bereich  $c_1 < c < c_2$  entspricht der Konstruktion der konvexen Hülle.

Zur näheren Begründung und zur Berechnung des thermodynamisch stabilen Zustands lassen wir zu festem  $N_A$  und  $N_B$  zwei Phasen 1 und 2 zu, mit unbekanntem Konzentrationen  $c_1$  bzw.  $c_2$  sowie unbekanntem Gesamtmenge  $N_1$  bzw.  $N_2$  der zugehörigen Atome. Die Gesamtzahl aller Atome ist gegeben durch

$$N_A + N_B = N_1 + N_2 = N \quad (2.75)$$

Wegen  $N_{A,B} = N_1(1 \pm c_1)/2 + N_2(1 \pm c_2)/2$  haben wir außerdem

$$N_A - N_B = N_1c_1 + N_2c_2 \quad (2.76)$$

Von der gesamten freien Energie  $F_{ges} = N_1f(T, c_1) + N_2f(T, c_2)$  ist nun das Minimum zu suchen bezüglich der 4 Variablen  $N_1, N_2, c_1, c_2$ , die den beiden Nebenbedingungen (2.75) und (2.76) unterliegen. Mit den Lagrange-Multiplikatoren  $\lambda$  und  $\mu$  setzen wir also für  $i = 1$  und  $2$ ,

$$\frac{\partial}{\partial N_i} (F_{ges} - \lambda(N_1 + N_2) - \mu(N_1c_1 + N_2c_2)) = 0 \quad (2.77)$$

$$\frac{\partial}{\partial c_i} (F_{ges} - \lambda(N_1 + N_2) - \mu(N_1c_1 + N_2c_2)) = 0 \quad (2.78)$$

Man erhält die vier Gleichungen

$$f(T, c_i) - \lambda - \mu c_i = 0 \quad (2.79)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)_{c_1} = \left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)_{c_2} = \mu \quad (2.80)$$

Elimination von  $\lambda$  ergibt

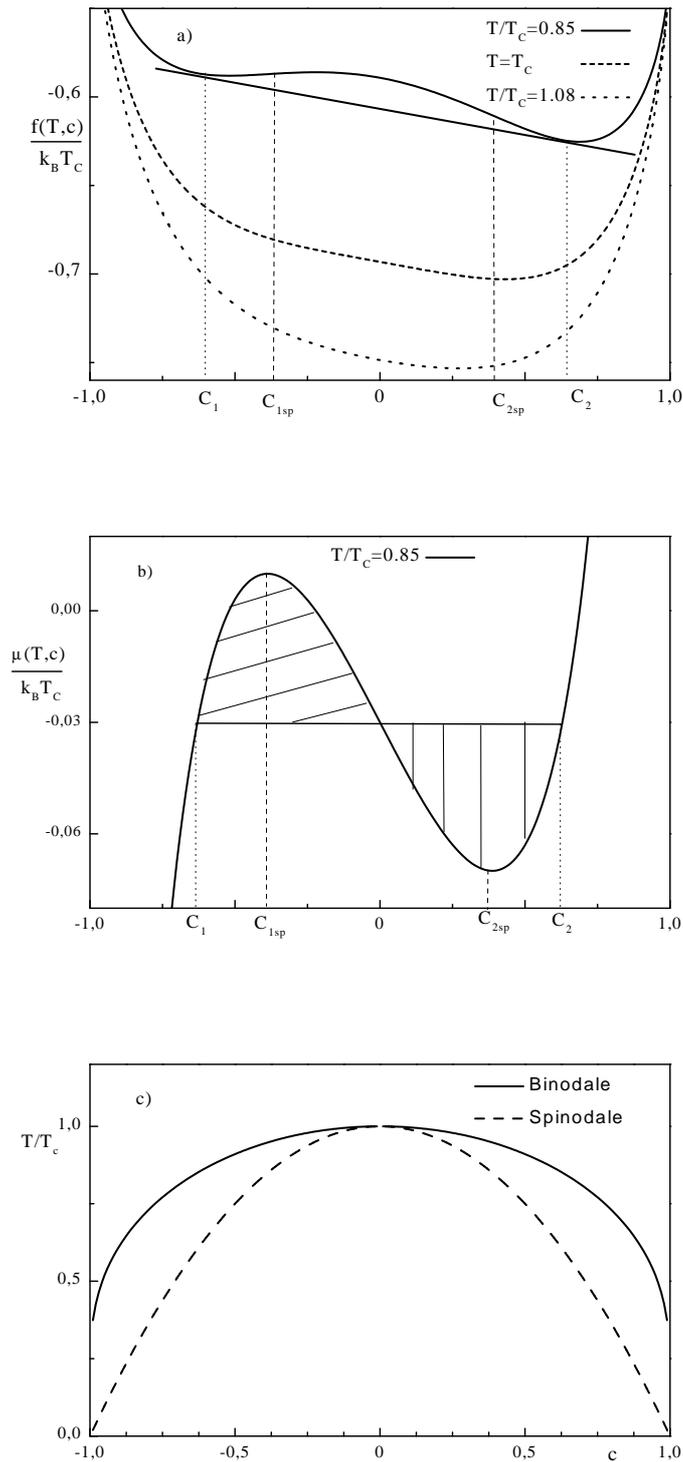
$$\frac{f(T, c_1) - f(T, c_2)}{c_1 - c_2} = \mu \quad (2.81)$$

Die Gleichungen (2.80) und (2.81) besagen, daß die 1. Ableitungen von  $f(T, c)$  bei  $c_1$  und  $c_2$  untereinander gleich und außerdem gleich dem Differenzenquotienten sind. Damit wird gerade die Konstruktion der gemeinsamen Tangente ausgedrückt. Falls  $f(T, c)$  überall konvex ist ( $T > T_c$ ), werden diese Gleichungen für jedes  $c_1 = c_2$  erfüllt. (2.80) identifiziert den Parameter  $\mu$  mit dem gemeinsamen chemischen Potential der beiden Phasen bei Koexistenz.

Punkte auf dem gemeinsamen Tangentenabschnitt in Abb. (2.4a) entsprechen der freien Energie eines Gemischs zweier Phasen der Zusammensetzung  $c_1$  und  $c_2$ ; die zugehörigen Mengenanteile genügen der "Hebel-Regel",

$$N_1(c - c_1) = N_2(c_2 - c) \quad (2.82)$$

Die Gleichheit der schraffierten Flächen in Abb. (2.4b) erkennt man an



**Abbildung 2.4:** a) Freie Energie pro Atom in Abhängigkeit von der Konzentration  $c = (N_A - N_B)/(N_A + N_B)$  für drei Temperaturen  $T > T_c$ ,  $T = T_c$  bzw.  $T < T_c$ . Eingezeichnet sind die Konzentrationen  $c_1$  und  $c_2$  koexistierender Phasen nach der Maxwell-Konstruktion sowie der spinodale Bereich  $c_{1sp} < c < c_{2sp}$ . b) Chemisches Potential  $\mu(T, c) = \partial f(T, c)/\partial c$  für  $T < T_c$ . Die schraffierten Flächen sind gleich groß. c) Phasendiagramm: Koexistenzkurve (“Binodale”) und “Spinodale”. (Die Graphik bezieht sich auf das Modell (2.74) mit  $h/k_B T_c = 0.03$ .)

$$\int_{c_1}^{c_2} dc \left[ \frac{\partial f}{\partial c} - \left( \frac{\partial f}{\partial c} \right)_{c_1} \right] = f(c_2) - f(c_1) - \left( \frac{\partial f}{\partial c} \right)_{c_1} (c_2 - c_1) = 0 \quad (2.83)$$

Im spinodalen Bereich  $c_{1sp} < c < c_{2sp}$  ist wegen  $\partial^2 f / \partial c^2 < 0$  eine homogene Phase instabil gegenüber infinitesimalen Konzentrationsfluktuationen, während in den *metastabilen* Gebieten  $c_1 < c < c_{1sp}$  und  $c_{2sp} < c < c_2$  Fluktuationen einer Mindestgröße (kritischer Keim) auftreten müssen, um die Phasentrennung in Gang zu setzen.

## 2.5 Ginzburg–Landau Theorie

Auf phänomenologischer Ebene erfährt die einfache Landau–Theorie (§1.4) durch das “Ginzburg–Landau (GL)–Modell” eine tiefgehende Verallgemeinerung. Zentraler Gedanke ist die Einbeziehung räumlicher Fluktuationen des Ordnungsparameters. Beschränkt man sich auf langwellige Fluktuationen, so läßt sich eine konzeptionell einfache Theorie formulieren, die, wie sich herausstellt, gerade in der Nähe kritischer Punkte besonders aussagekräftig ist und einen weitgehend allgemeinen Rahmen zur Behandlung kritischer Phänomene abgibt. Ursache hierzu ist die Erkenntnis, daß die das physikalische Geschehen dominierenden Fluktuationen bei Annäherung an einen kritischen Punkt zunehmend langwelliger werden; die zugehörige Längenskala, die Korrelationslänge  $\xi$ , divergiert am kritischen Punkt. Je mehr man sich dem kritischen Punkt nähert, umso besser ist also das GL–Modell gerechtfertigt.

Die dem Ordnungsparameter entsprechende mikroskopische Observable  $\hat{\phi}(\vec{x})$  (bei magnetischen Systemen die mikroskopische Magnetisierungsdichte, beim Übergang Flüssigkeit–Gas die mikroskopische Teilchendichte etc.) wird zunächst, um Fluktuationen auf mikroskopischen Längenskalen zu eliminieren, über eine Länge  $l$  gemittelt, mit

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{intermolekulare} \\ \text{Abstände} \end{array} \right\} \ll l \ll \left\{ \begin{array}{c} \text{makroskopische} \\ \text{Probengröße} \end{array} \right\}$$

Dieses als “coarse–graining” (Vergrößerung) bezeichnete Vorgehen ist analog dem Mittelungsverfahren beim Übergang von den mikroskopischen zu den makroskopischen Maxwell–Gleichungen in der Elektrodynamik. Äquivalent dazu kann man sich  $\hat{\phi}(\vec{x})$  in Fourier–Komponenten zerlegt denken; Fourier–Komponenten zu Wellenvektoren  $\vec{q}$  mit  $|\vec{q}| > \Lambda \sim l^{-1}$  werden abgeschnitten, d.h. gleich Null gesetzt. Auf diese Weise entsteht der “vergrößerte” Ordnungsparameter  $\phi(\vec{x})$ . Da ein Mittelwert über viele Teilchen gebildet wird, kann  $\phi(\vec{x})$  als klassische Größe aufgefaßt werden.

Die Differenz der freien Energie  $\Delta F$  zwischen einem durch  $\phi(\vec{x})$  beschriebenen Ordnungszustand und dem ungeordneten Zustand  $\phi(\vec{x}) \equiv 0$  wird nun als Funktional von  $\phi(\vec{x})$  folgender Form aufgefaßt,

$$\Delta F[\phi(\vec{x})] = \int_V d^d x \left[ f(\phi(\vec{x})) + \frac{\kappa}{2} (\vec{\nabla} \phi)^2 \right] \quad (2.84)$$

Integriert wird über das Volumen  $V = L^d$  des Systems der räumlichen Dimension  $d$ .  $f(\phi)$  bezeichnet die Dichte der freien Energie eines homogen geordneten Zustands. Wie in Gl. (1.15) nehmen wir an, daß

$$f(\phi) = \frac{r}{2} \phi^2 + u \phi^4 \quad (2.85)$$

mit  $r(T) = r_0(T - T_c)/T_c$ ;  $r_0 > 0$ ,  $u > 0$ . Da  $\phi(\vec{x})$  sich örtlich nur langsam verändert, werden im GL–Funktional nur 1. Ableitungen von  $\phi$  mitgenommen; der einfachste skalare Term, der sich aus 1. Ableitungen bilden läßt, ist  $(\vec{\nabla} \phi)^2$ . Wieviel freie Energie eine örtliche Veränderung von  $\phi(\vec{x})$  kostet, wird durch den Parameter  $\kappa > 0$  ausgedrückt. Es ist klar, daß sich in  $\kappa$  die Wechselwirkungen innerhalb des Systems widerspiegeln.

Den oben diskutierten Abschneideparameter  $\Lambda$  wählt man sinnvollerweise so, daß  $\Lambda \simeq \xi_0^{-1}$  mit

$$\xi_0 = \left( \frac{\kappa}{r_0} \right)^{1/2} \quad (2.86)$$

Dies stellt sicher, daß der Term  $\propto (\nabla\phi)^2$  in (2.84) nicht größer als etwa  $r_0\phi^2$  werden kann. (Andernfalls müßten noch höhere Ableitungen von  $\phi$  mitgenommen werden.) Ein Vergleich mit mikroskopischen Theorien zeigt, daß die Länge  $\xi_0$  sich als Reichweite der effektiven Wechselwirkungen im System interpretieren läßt. Die Ergebnisse der Theorie hängen jedoch nicht wesentlich von der genauen Größe des Abschneideparameters  $\Lambda$  ab.

Nach den allgemeinen Prinzipien der statistischen Mechanik ist im thermischen Gleichgewicht die Wahrscheinlichkeit  $P[\phi(\vec{x})]$  für eine bestimmte Konfiguration des Ordnungsparameters  $\phi(\vec{x})$  gegeben durch den Boltzmann-Faktor

$$P[\phi(\vec{x})] = \frac{1}{Z_{sing}} \exp(-\beta\Delta F[\phi(\vec{x})]) \quad (2.87)$$

Der Normierungsfaktor ist nichts anderes als die Zustandssumme  $Z$  des Systems, normiert auf die Zustandssumme  $Z_0$  für den ungeordneten Fall  $\phi \equiv 0$ . Dieses Verhältnis  $Z/Z_0$  bezeichnen wir mit  $Z_{sing}$ , da hierin gerade die aus den Fluktuationen resultierenden Singularitäten in den thermodynamischen Größen enthalten sind. Mit

$$Z_{sing} = \int \mathcal{D}\phi \exp(-\beta\Delta F[\phi(\vec{x})]) \quad (2.88)$$

ist der singuläre Anteil der freien Energie gegeben durch

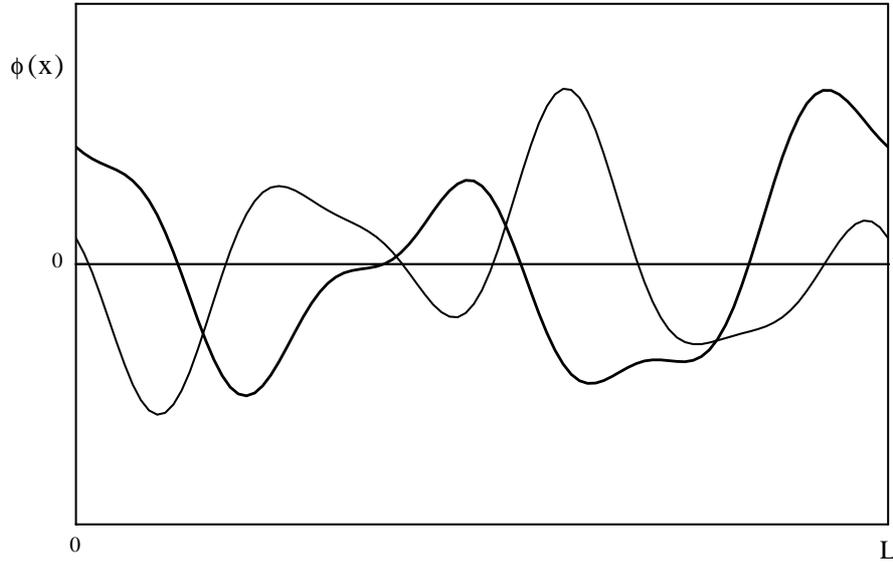
$$\Delta F_{sing}(T, V) = -k_B T \ln Z_{sing} \quad (2.89)$$

Das Symbol  $\int \mathcal{D}\phi \dots$  in (2.88) bezeichnet ein sogenanntes Funktionalintegral, anschaulich gesprochen eine "Summation" über alle möglichen Ordnungsparameter-Konfigurationen. Abb. (2.5) zeigt schematisch über einem Intervall  $[0, L]$  in  $d = 1$  verschiedene Ordnungsparameterverläufe unter der Randbedingung  $\phi(0) = \phi(L)$ . Mathematisch wird das Funktionalintegral definiert, indem man  $\phi(\vec{x})$  durch seine Fourier-Komponenten  $\phi_{\vec{q}}$  parametrisiert,

$$\phi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\substack{\vec{q} \\ |\vec{q}| < \Lambda}} \phi_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{r}}; \quad \vec{q} = 2\pi\vec{n}/L \quad (2.90)$$

( $\vec{n}$  = ganzzahliger Vektor) und über alle unabhängigen Fourier-Komponenten integriert,

$$\int \mathcal{D}\phi \dots = \prod_{\substack{\vec{q} \\ |\vec{q}| < \Lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\text{Re}\phi_{\vec{q}}) \int_{-\infty}^{\infty} d(\text{Im}\phi_{\vec{q}}) \dots \quad (2.91)$$



**Abbildung 2.5:** Verschiedene Ordnungsparameter-Konfigurationen, die zum Funktionalintegral (2.88) beitragen. Das System hat die Ausdehnung  $L$ ; es sind periodische Randbedingungen angenommen.

Bei reellem Ordnungsparameter ist die Einschränkung  $\phi_{\vec{q}} = \phi_{-\vec{q}}^*$  zu beachten, so daß de facto nur Integrationen über  $\phi_{\vec{q}}$  zu einem  $\vec{q}$ -Halbraum eingehen.

Mit (2.87) lassen sich wie üblich Mittelwerte, z.B.  $\langle \phi(\vec{x}) \rangle$  oder die Ordnungsparameter-Korrelationsfunktion

$$\langle \phi(\vec{x})\phi(0) \rangle = \frac{1}{Z_{sing}} \int \mathcal{D}\phi \phi(\vec{x})\phi(0) \exp(-\beta\Delta F[\phi]) \quad (2.92)$$

berechnen.

Zu bemerken ist, daß die kritische Temperatur durch Mitberücksichtigung der Ordnungsparameter-Fluktuationen renormiert wird: Die beobachtete kritische Temperatur  $T_{crit}$ , bei der Singularitäten auftreten, ist gegenüber der “unrenormierten” kritischen Temperatur  $T_c$ , definiert durch  $r(T_c) = 0$ , zu tieferen Werten verschoben. In 1-dimensionalen Systemen ist  $T_{crit} = 0$ .

Durch (2.88) oder (2.92) wird ein schwieriges Problem der klassischen Feldtheorie gestellt. Exakt lösbar ist der Fall  $d = 1$ . Auf eine Weiterbehandlung für  $d > 1$  im Rahmen der Renormierungsgruppentheorie gehen wir in §3 ein.

Zur einfachen Landau-Theorie (§1.2) kehrt man zurück, wenn bei Mittelwertbildungen nur die wahrscheinlichste Ordnungsparameter-Konfiguration berücksichtigt wird, bestimmt durch

$$P[\phi] = max. \quad \Leftrightarrow \quad \Delta F[\phi] = min. \quad (2.93)$$

Sind keine Randbedingungen an  $\phi(\vec{x})$  gestellt, so wird  $\Delta F$  offenbar durch ein konstantes  $\phi$  minimiert, welches der Bedingung  $\partial f/\partial\phi = 0$  genügt, vgl. §1.2.

### Gauß–Näherung (Ornstein–Zernike–Theorie)

Wir beschränken uns im folgenden auf  $T > T_c$ . (Der Fall  $T < T_c$  kann völlig analog behandelt werden.) Wie aus (2.87) mit (2.84) und (2.85) ersichtlich, werden mit wachsendem  $r > 0$  die Ordnungsparameter–Fluktuationen stärker unterdrückt. Genügend weit oberhalb  $T_c$  können also die Terme  $\propto \phi^4$  in (2.84) gegenüber den quadratischen Termen vernachlässigt werden. (Bzgl. eines quantitativen Kriteriums vgl. §2.6.) Wir approximieren also

$$\Delta F[\phi(\vec{x})] \simeq \frac{1}{2} \int_V d^d x [r\phi^2 + \kappa(\vec{\nabla}\phi)^2] \quad (2.94)$$

Es sei fortan  $\phi$  reell. Mit der Fourier–Darstellung ( $V = L^d$ ; impliziert werden stets periodische Randbedingungen bzw. periodische Fortsetzung)

$$\phi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{x}}; \quad \vec{q} = 2\pi\vec{n}/L \quad (2.95)$$

und den (teils später gebrauchten) Rechenregeln

$$\phi_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V d^d x \phi(\vec{x}) e^{-i\vec{q}\vec{x}} = \phi_{-\vec{q}}^* \quad (2.96)$$

$$\int_V d^d x e^{i(\vec{p}-\vec{q})\vec{x}} = V \delta_{\vec{p},\vec{q}} \quad (2.97)$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}(\vec{x}-\vec{x}')} = \delta(\vec{x}-\vec{x}') \quad (2.98)$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \cdots \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \cdots \quad (2.99)$$

finden wir ( $q \equiv |\vec{q}|$ )

$$\Delta F = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} (r + \kappa q^2) |\phi_{\vec{q}}|^2 \quad (2.100)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung (2.87) faktorisiert also,

$$\exp(-\beta \Delta F) = \prod_{\vec{q}} \exp\left[-\frac{\beta}{2} (r + \kappa q^2) |\phi_{\vec{q}}|^2\right] \quad (2.101)$$

Dies bedeutet zunächst, daß Fourier–Komponenten zu unterschiedlichen Wellenvektoren statistisch unabhängig sind. (2.101) führt deshalb mit  $\langle \phi_{\vec{q}} \rangle = 0$  auf

$$\langle \phi_{\vec{p}}^* \phi_{\vec{q}} \rangle = \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle \delta_{\vec{p},\vec{q}} \quad (2.102)$$

(Dieser Ausdruck ist auch für  $\vec{p} = -\vec{q}$  richtig:  $\langle \phi_{-\vec{q}}^* \phi_{\vec{q}} \rangle = \langle \phi_{\vec{q}}^2 \rangle = \langle (\text{Re}\phi_{\vec{q}})^2 - (\text{Im}\phi_{\vec{q}})^2 \rangle + 2i\langle \text{Re}\phi_{\vec{q}} \cdot \text{Im}\phi_{\vec{q}} \rangle = 0$ .) Zudem ist jede Fourier-Komponente  $\phi_{\vec{q}}$  nach (2.101) Gauß-verteilt mit der unmittelbar ablesbaren mittleren quadratischen Abweichung (beachte  $\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle = \langle (\text{Re}\phi_{\vec{q}})^2 + (\text{Im}\phi_{\vec{q}})^2 \rangle$ )

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle = \frac{k_B T}{r + \kappa q^2} \quad (2.103)$$

Die Intensität der Fluktuationen mit Wellenvektor  $\vec{q}$  ist also proportional zu  $k_B T$  und umgekehrt proportional zu der in (2.100) auftretenden ‘‘Rückstellkraft’’; vgl. hierzu den Gleichverteilungssatz der klassischen Statistischen Mechanik für Freiheitsgrade, die quadratisch und additiv in die Hamilton-Funktion eingehen.

Im Falle eines komplexen Ordnungsparameters erscheint in (2.103) auf der r.S. zusätzlich ein Faktor 2.

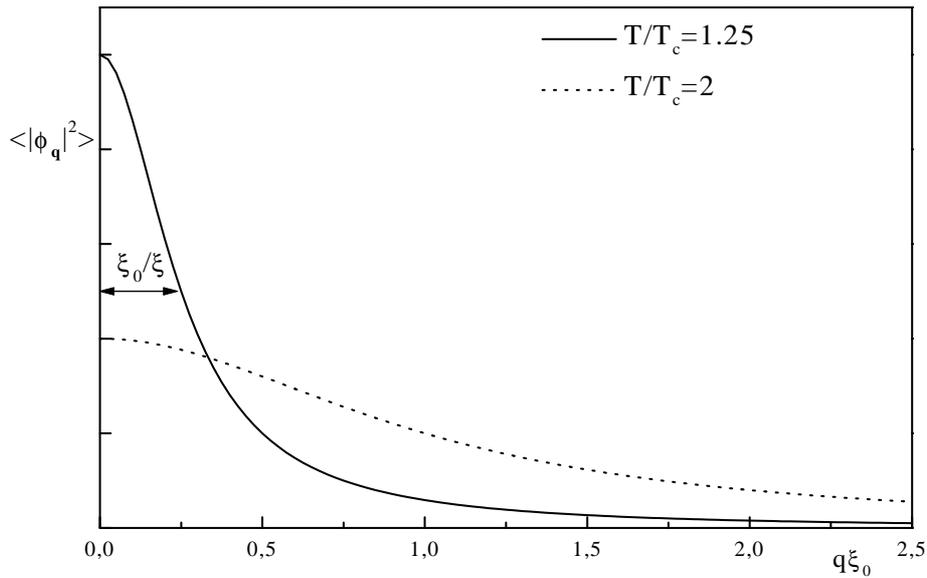
Eine wichtige Größe ist die Korrelationslänge

$$\xi = \left( \frac{\kappa}{r} \right)^{1/2} = \xi_0 \left( \frac{T_c}{T - T_c} \right)^{1/2}, \quad (2.104)$$

wobei nach (2.86)  $\xi_0 = (\kappa/r_0)^{1/2}$ . Damit können wir schreiben

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle = \frac{k_B T}{r} \frac{1}{1 + (q\xi)^2} \quad (2.105)$$

Bezüglich der  $q$ -Abhängigkeit erhält man also eine in Abb. (2.6) dargestellte Lorentz-Funktion mit der typischen Breite  $\xi^{-1}$ . Die ortsabhängige Korrelationsfunktion ergibt sich bei Beachtung von (2.95) im Limes  $V \rightarrow \infty$  als Fourier-Transformierte von (2.105)



**Abbildung 2.6:**  $q$ -Abhängigkeit der Ordnungsparameter-Korrelationsfunktion (2.105) für zwei verschiedene Temperaturen  $T > T_c$ .

$$\langle \phi(\vec{x})\phi(0) \rangle = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle e^{i\vec{q}\vec{x}} \quad (2.106)$$

In  $d = 3$  entsteht das Integral

$$\int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{q^2 + \xi^{-2}} e^{i\vec{q}\vec{x}} = \frac{e^{-x/\xi}}{x} \quad (2.107)$$

Die  $x$ -Abhängigkeit der Korrelationsfunktion folgt also dem bekannten Ausdruck für das abgeschirmte Coulomb-Potential bzw. Yukawa-Potential,

$$\langle \phi(\vec{x})\phi(0) \rangle = \frac{k_B T}{4\pi\kappa} \frac{e^{-x/\xi}}{x} \quad (2.108)$$

(2.107) zeigt man durch direkte Berechnung der l.S. mit Hilfe des Residuensatzes oder durch Betrachtung der Greenfunktion zum Differentialoperator  $\Delta - \xi^{-2}$  unter Ausnutzung der sphärischen Symmetrie.

Das Ergebnis (2.108) unterstreicht die Bedeutung von  $\xi$  als typische Reichweite der Korrelationen. Wenn  $(T - T_c)/T_c \ll 1$ , so gilt  $\xi \gg \xi_0$ , d.h. die Reichweite der Korrelation ist wesentlich größer als die Reichweite der Kräfte! Man beachte auch, daß die Hauptbeiträge zum Integral (2.107) aus dem Bereich  $|\vec{q}| \lesssim \xi^{-1}$  des Impulsraums stammen. Bei  $\xi \gg \xi_0$  kann man also bedenkenlos über den gesamten  $\vec{q}$ -Raum integrieren; der Abschneideparameter  $\Lambda = \xi_0^{-1}$  spielt an dieser Stelle keine Rolle.

Bei  $T = T_c$  ergibt sich aus (2.105) und (2.107)

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle \sim q^{-2} \quad (2.109)$$

$$\langle \phi(\vec{x})\phi(0) \rangle \sim x^{-1} \quad (2.110)$$

Diese Ausdrücke, in denen keine charakteristische Länge auftritt ( $\xi = \infty!$ ), entsprechen der Form eines nicht-abgeschirmten Coulomb-Potentials.

Für  $T < T_c$  untersucht man in gleicher Weise kleine Fluktuationen des Ordnungsparameters um den wahrscheinlichsten Wert, mit im wesentlichen demselben Ergebnis (2.105).

Die Ergebnisse dieses Abschnitts sind zu der auf Ornstein und Zernike zurückgehenden Theorie der Fluktuationen in der Nähe des kritischen Punktes einer klassischen Flüssigkeit äquivalent. Grenzen der Theorie liegen zum einen in der Beschränkung auf  $q\xi_0 < 1$ , zum anderen in der Vernachlässigung der Wechselwirkung der Amplituden  $\phi_{\vec{q}}$ , hervorgerufen durch den Term  $u\phi^4$  im GL-Funktional.

### Lichtstreuung an Flüssigkeiten

Das Fluktuationsspektrum  $\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle$  kann in vielen Fällen durch Streuexperimente direkt beobachtet werden. Experimentell leicht nachweisbar sind die Auswirkungen von Fluktuationen mit Wellenvektoren  $q \sim (10^3 \text{Å})^{-1}$  auf die Lichtstreuung an einer klassischen Flüssigkeit in der Nähe ihres kritischen Punktes. Sichtbares Licht wird

gestreut an den räumlichen Schwankungen  $\delta\epsilon(\vec{x})$  der Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon$ , die durch Schwankungen  $\delta n(\vec{x}) = n(\vec{x}) - n_c$  in der Teilchendichte hervorgerufen sind ( $n_c$  = Dichte am kritischen Punkt). Die Schwankungen auf der Skala der Lichtwellenlänge sind so langsam, daß sich lokal thermisches Gleichgewicht einstellt. Dann kann der im Gleichgewicht gültige Zusammenhang  $\epsilon = \epsilon(n, T)$  herangezogen werden. In den meisten Fällen ist die explizite Abhängigkeit von der Temperatur vernachlässigbar, so daß

$$\delta\epsilon(\vec{x}) \simeq \left( \frac{\partial\epsilon}{\partial n} \right)_T \delta n(\vec{x}) \quad (2.111)$$

Der Wirkungsquerschnitt für Lichtstreuung ist somit gegeben durch

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \langle |\delta\epsilon_{\vec{q}}|^2 \rangle = \left( \frac{\partial\epsilon}{\partial n} \right)_T^2 \langle |\delta n_{\vec{q}}|^2 \rangle \quad (2.112)$$

wobei nach der Ornstein–Zernike–Theorie (2.105)

$$\langle |\delta n_{\vec{q}}|^2 \rangle \propto \frac{1}{T - T_c} \cdot \frac{1}{1 + (q\xi)^2} \quad (2.113)$$

Für  $T \rightarrow T_c$  wird die Streuung besonders intensiv und auf die Vorwärtsrichtung ( $|\vec{q}| \lesssim \xi^{-1}$ ) konzentriert. Diese Erscheinung bezeichnet man als kritische Opaleszenz.

### Ordnungsparameter–Suszeptibilität

Bei Anwesenheit eines äußeren Feldes  $h(\vec{x})$ , welches linear an den Ordnungsparameter koppelt, ist das GL–Funktional gegeben durch

$$\Delta F_h[\phi(\vec{x})] = \Delta F[\phi(\vec{x})] - \int_V d^d x h(\vec{x}) \phi(\vec{x}) \quad (2.114)$$

Zur Berechnung des wahrscheinlichsten Ordnungsparameters  $\phi_0(\vec{x})$  wird  $F_h$  minimiert. Notwendig ist das Verschwinden der Funktionalableitung

$$\frac{\delta F_h[\phi]}{\delta \phi(\vec{x})} = 0, \quad (2.115)$$

(Hinsichtlich des Begriffs der Funktionalableitung vergleiche man z.B. die Auswertung des Hamiltonschen Prinzips der klassischen Mechanik.) Es folgt die Differentialgleichung (Eulersche Gleichung)

$$r\phi(\vec{x}) + 4u(\phi(\vec{x}))^3 - \kappa \vec{\nabla}^2 \phi(\vec{x}) - h(\vec{x}) = 0 \quad (2.116)$$

Bei hinreichend schwachem Feld  $h(\vec{x})$  können wir uns auf die lineare Systemantwort beschränken. Außerdem betrachten wir nur  $T > T_c$ . Der Term  $\propto \phi^3$  bleibt dann unberücksichtigt. Weiterbehandelt wird (2.116) mittels Fourier–Transformation. Wie üblich hat man für ein endliches System mit Volumen  $L^d$  und periodischen Randbedingungen diskrete Wellenvektoren  $\vec{q}$ . Wegen der vorausgesetzten Linearität des

Problems genügt es, zunächst nur *eine* nicht-verschwindende Fourier-Komponente  $h_{\vec{q}}$  des äußeren Feldes anzunehmen und gegebenenfalls (bei allgemeinem  $h(\vec{x})$ ) im Endergebnis verschiedene Fourier-Komponenten zu superponieren.

Es sei also

$$h(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} h_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{x}} + c.c. \quad (2.117)$$

Dann besitzt auch der Ordnungsparameter nur die nicht-verschwindende Fourier-Komponente

$$\phi_{\vec{q}} = \chi_{\vec{q}} h_{\vec{q}}, \quad (2.118)$$

die zu  $h_{\vec{q}}$  proportional ist. (2.118) definiert die vom Wellenvektor  $\vec{q}$  abhängige Suszeptibilität

$$\chi_{\vec{q}} = \frac{1}{r + \kappa q^2} \quad (2.119)$$

die sich im langwelligen Grenzfall auf (1.24) reduziert,  $\chi_{\vec{q}=0} = r^{-1}$ .

Durch Vergleich mit (2.105) erkennt man den Zusammenhang

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle = k_B T \chi_{\vec{q}} \quad (2.120)$$

Gleichung (2.120) stellt den statischen Limes des (viel allgemeineren) “Fluktuations-Dissipations-Theorems” dar. Die l.S. kennzeichnet die Ordnungsparameter-Fluktuationen im Gleichgewicht innerhalb des “ungestörten” Systems ( $h = 0$ ) während die r.S. die lineare Reaktion des Systems auf ein schwaches  $h$ -Feld beschreibt. Auf ein magnetisches System angewandt entspricht (2.120) für den Wellenvektor  $\vec{q} = 0$  dem aus der statistischen Mechanik bekannten Zusammenhang zwischen den Fluktuationen der Magnetisierung und der magnetischen Suszeptibilität. Tatsächlich gilt (2.120) ganz allgemein und unabhängig von der GL-Theorie.

Anstelle (2.120) kann man auch schreiben, vgl. (2.106),

$$\int d^d x \langle \phi(\vec{x}) \phi(0) \rangle e^{-i\vec{q}\vec{x}} = k_B T \chi_{\vec{q}} \quad (2.121)$$

Im Grenzfall  $\vec{q} \rightarrow 0$  besagt diese Beziehung, daß die Suszeptibilität  $\chi_{\vec{q}=0}$  proportional ist zum Integral über die Korrelationsfunktion. Das Anwachsen der Suszeptibilität für  $T \rightarrow T_c$  ist also unmittelbar verknüpft mit einer Zunahme der Reichweite der Korrelation im Ortsraum, d.h. mit der Zunahme der Korrelationslänge. Bei  $T = T_c$  fällt allgemein die Korrelationsfunktion so langsam ab, daß das Integral  $\int d^d x \langle \phi(\vec{x}) \phi(0) \rangle$  divergiert, und damit auch  $\chi_{\vec{q}=0}$  divergiert. Die Ergebnisse der Ornstein-Zernike-Theorie (2.107) und (2.110) illustrieren diese auf (2.121) beruhenden allgemeinen Aussagen.

Abschließend bemerken wir, daß eine  $\vec{q}$ -abhängige Suszeptibilität im Ortsraum einen nicht-lokalen Zusammenhang zwischen Ordnungsparameter und Feld impliziert,

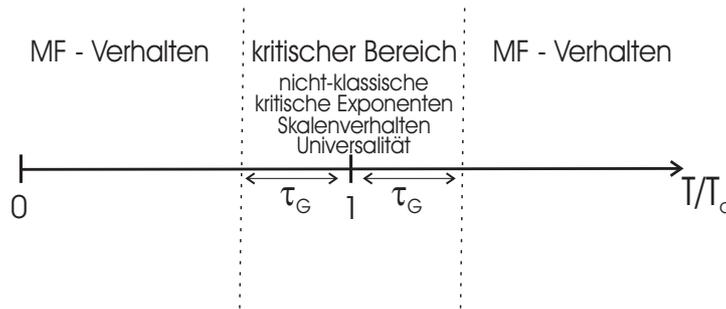
$$\phi(\vec{x}) = \int d^d x' \chi(\vec{x} - \vec{x}') h(\vec{x}') \quad (2.122)$$

wobei der Integralkern gegeben ist durch

$$\chi(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \chi_{\vec{q}} e^{i\vec{q}(\vec{x} - \vec{x}')}.$$
 (2.123)

## 2.6 Ginzburg–Kriterium, kritischer Bereich

Wie in §2.4 gezeigt, beschreibt die Gauß–Näherung im Bereich  $T > T_c$  ein Anwachsen der Fluktuationen mit sinkender Temperatur. Die Frage stellt sich, wann unter diesen Umständen der Term 4. Ordnung im Landau–Funktional gegenüber den quadratischen Termen so starken Einfluß gewinnt, daß die Gauß–Näherung zusammenbricht. Zu vergleichen ist also die Größenordnung der Terme  $(r/2)\langle(\phi(\vec{x}))^2\rangle$  und  $u\langle(\phi(\vec{x}))^4\rangle$ . Für eine Abschätzung genügt es, die auftretenden Mittelwerte durch Gaußsche Mittelwerte zu approximieren. Diejenige Temperatur, bei der beide Terme von gleicher Größenordnung sind, bezeichnet man als Ginzburg–Temperatur  $T_G$ , die natürlich nicht als scharfe Grenze zu verstehen ist. Wir setzen  $\tau = (T - T_c)/T_c$ . Der durch  $|\tau| \lesssim \tau_G \equiv |T_G - T_c|/T_c$  gekennzeichnete Temperaturbereich oberhalb und unterhalb  $T_c$  ist der sogenannte *kritische Bereich*. Im kritischen Bereich wird die Wechselwirkung zwischen den Amplituden  $\phi_{\vec{q}}$  auf Grund des Terms  $u\phi^4$  in (2.85) wesentlich. Man spricht von “kritischen Fluktuationen”, die für die eigentlichen kritischen Phänomene, vgl. § 1.1 und § 3.1, verantwortlich sind. Schematisch entsteht das folgende Bild:



Zur Abschätzung von  $\tau_G$  gibt es mehrere Wege, die bis auf irrelevante Zahlenfaktoren zum gleichen Ergebnis führen. Anstatt den oben nur angedeuteten Weg auszuführen, diskutieren wir folgende einfachere Vorgehensweisen.

i) Herleitung für  $T < T_c$  ( $d=3$ )

Der Ordnungsparameter besitzt einen nicht-verschwindenden Mittelwert, der nach der einfachen Landau–Theorie durch den wahrscheinlichsten Wert  $\langle\phi(\vec{x})\rangle \simeq \phi_0$  mit  $\phi_0^2 = |r|/4u$  ersetzt wird. Mit  $\phi_0$  wird die typische Größe der Fluktuationen  $\delta\phi(\vec{x}) = \phi(\vec{x}) - \phi_0$  verglichen, die wiederum aus der Gauß–Näherung bestimmt wird. Für  $T < T_c$  liefert die Gauß–Näherung einen Ausdruck derselben Form wie im Fall  $T > T_c$ , vgl. (2.108),

$$\langle\delta\phi(\vec{x})\delta\phi(0)\rangle \simeq \frac{k_B T}{4\pi\kappa} \frac{e^{-x/\xi}}{x} \quad (2.124)$$

Lediglich für die Korrelationslänge ist bei  $T < T_c$  der Ausdruck  $\xi^2 = \kappa/(2|r|)$  zu verwenden. Entscheidend für die experimentelle Beobachtung sind Fluktuationen auf der Längenskala  $\xi$ . Setzt man daher  $x = \xi$ , so charakterisiert (2.124) die typische Größenordnung der Fluktuationen. Zuverlässig ist die Gauss–Näherung, solange

$$\frac{k_B T_c}{4\pi\kappa} \cdot \frac{1}{\xi} \ll \phi_0^2 \quad (2.125)$$

Dabei wurde auf der l.S. der unwesentliche Faktor  $2^{1/2}e^{-1}$  weggelassen und im Zähler wurde  $T$  durch  $T_c$  ersetzt. Anstelle (2.125) können wir auch schreiben  $|\tau| \gg \tau_G$ , wobei wir als Maß für die Breite des kritischen Gebiets den Ausdruck

$$\tau_G = \frac{(k_B T_c u)^2}{\pi^2 r_0 \kappa^3}; \quad (d = 3) \quad (2.126)$$

gefunden haben. Das erhaltene Kriterium für die Gültigkeit der Gauß-Näherung mit (2.126) für  $\tau_G$  bezeichnet man als Ginzburg-Kriterium, hier für die Raumdimension  $d = 3$ . Die anfangs skizzierte Überlegung für  $T > T_c$  führt auf das gleiche Ergebnis.

Übersichtlicher wird (2.126), wenn man die r.S. nur durch experimentell zugängliche Größen ausdrückt. Mit der effektiven Reichweite der Kräfte und dem nach der Landau-Theorie gegebenen Sprung in der Wärmekapazität  $\Delta C/V = r_0^2/8uT_c$  wird

$$\tau_G = \left( \frac{k_B}{8\pi\Delta C/V} \right)^2 \xi_0^{-6} \quad (2.127)$$

Man erkennt eine äußerst empfindliche Abhängigkeit von  $\xi_0$ . Je größer die effektive Reichweite der Kräfte, um so stärker werden Fluktuationen unterdrückt und der kritische Bereich eingengt. Beispiele:

- Konventionelle (metallische) Supraleiter  
Nach der BCS-Theorie gilt  $\xi_0 \simeq \hbar v_F/\Delta_0$ ;  $v_F$  bzw.  $\Delta_0$  bezeichnen die Fermi-Geschwindigkeit und die Energielücke des Supraleiters bei  $T = 0$ . Typischerweise ist  $\xi_0 \gtrsim 10^3 A^0$ ; dies führt auf den extrem kleinen Wert  $\tau_G \sim 10^{-14}$ . Molekularfeld-artige Theorien (BCS-Theorie oder die damit verknüpfte Landau-Theorie) sind also praktisch als exakt anzusehen.
- Suprafluidität in  ${}^4\text{He}$   
Die Größe  $\xi_0$  entspricht dem interatomaren Abstand, so daß  $\tau_G \sim 1$ . Molekularfeld-artige Theorien sind grundsätzlich nicht geeignet.
- Magnetische Systeme  
Hier sind zumeist kurzreichweitige Wechselwirkungen dominant. Ein grober Richtwert ist  $\tau_G \sim 10^{-2}$  bis  $10^{-1}$ . Ähnliches gilt für die Hoch- $T_c$ -Supraleiter.

ii) Abschätzung mittels der Wärmekapazität

Im Rahmen der Gauß-Näherung läßt sich die Zustandssumme (2.88) unter Berücksichtigung des Cutoffs  $\Lambda \sim \xi_0^{-1}$  leicht auswerten. Man erhält so einen genäherten Fluktuationsbeitrag zur Wärmekapazität. Für  $T > T_c$  und  $d = 3$  findet man  $C_{sing}/V \simeq (k_B/16\pi)\xi_0^{-4}\xi \propto \tau^{-1/2}$ . Fragt man nach derjenigen Temperatur, bei der  $C_{sing}$  vergleichbar wird mit dem Sprung  $\Delta C$ , so ergibt sich wieder die durch (2.127) bestimmte Ginzburg-Temperatur.

iii) Reduktion des GL-Funktional auf dimensionslose Größen

Die nachstehende Überlegung ist besonders einfach gleich für beliebige Raumdimensionen  $d$  durchführbar. Bezieht man den Ordnungsparameter auf den Wert  $\phi_0 =$

$(|r|/4u)^{1/2}$  und alle Längen auf die Korrelationslänge  $\xi = (\kappa/|r|)^{1/2}$ , so geht das Funktional (2.84) mit

$$\phi' = \phi/\phi_0; \quad \vec{x}' = \vec{x}/\xi; \quad \vec{\nabla}' = \partial/\partial\vec{x}'$$

über in

$$\begin{aligned} \Delta F[\phi] &= \int d^d x \left[ \frac{r}{2} \phi^2 + u \phi^4 + \frac{\kappa}{2} (\vec{\nabla} \phi)^2 \right] = \\ &= \xi^d |r| \phi_0^2 \cdot \frac{1}{2} \int d^d x' \left[ \phi'^2 (\pm 1 + \frac{1}{2} \phi'^2) + (\vec{\nabla}' \phi')^2 \right] \end{aligned} \quad (2.128)$$

Die beiden Vorzeichen entsprechen Temperaturen  $T > T_c$  bzw.  $T < T_c$ . Die Boltzmann-Verteilung  $\exp(-\beta F[\phi])$ , vgl. (2.87), enthält damit vor dem jetzt dimensionslosen Integral einen ebenfalls dimensionslosen,  $\tau$ -abhängigen Vorfaktor, der mit  $T \simeq T_c$  gegeben ist durch

$$\beta \xi^d |r| \phi_0^2 \simeq \frac{r_0^2 \xi_0^d}{4uk_B T_c} \tau^{2-d/2} \quad (2.129)$$

Gilt  $\beta \xi^d |r| \phi_0^2 \gg 1$ , so besitzt  $P[\phi] \propto \exp(-\beta F[\phi])$  ein sehr scharfes Maximum beim wahrscheinlichsten Wert des Ordnungsparameters, d.h. bei  $\phi_0$ , sofern  $T < T_c$  bzw. bei  $\phi = 0$ , wenn  $T > T_c$ . Fluktuationen des Ordnungsparameters sind dann weitgehend unterdrückt. Die Verhältnisse kehren sich um, wenn  $\beta \xi^d |r| \phi_0^2 \ll 1$  und das Maximum von  $P[\phi] \propto \exp(-\beta F[\phi])$  nur schwach ausgeprägt ist. Der letztgenannte Fall wird für hinreichend kleine  $\tau$  immer realisiert, sofern  $d < 4$ . Die Bedingung

$$\frac{r_0^2 \xi_0^d}{4uk_B T_c} \tau_G^{2-d/2} = 1 \quad (2.130)$$

definiert wiederum die Ginzburg-Temperatur  $T_G$  mit der bereits oben beschriebenen Bedeutung, jetzt für beliebige  $d$ . Falls  $d = 3$ , so führt (2.130) auf das bekannte Ergebnis (2.126) zurück. Der Fall  $d = 4$  verdient besondere Beachtung: Der Ausdruck (2.130) ist nun unabhängig von  $\tau$ . Für  $d > 4$  divergiert (2.130) sogar bei  $\tau \rightarrow 0$ , d.h. Fluktuationen werden für  $T \rightarrow T_c$  völlig unterdrückt und die GL-Theorie führt auf die einfache Landau-Theorie zurück. Den Grenzfall  $d^* = 4$  bezeichnet man als "marginale Dimension". Es konnte gezeigt werden, daß bei  $d^* = 4$  zu den klassischen kritischen Exponenten der einfachen Landau-Theorie logarithmische Korrekturen hinzutreten. Ein interessanter Aspekt bei trikritischen Punkten besteht darin, daß  $d^* = 3$ , die marginale Dimension also der realen Welt entspricht.

# Kapitel 3

## Statische kritische Phänomene

### 3.1 Skalenhypothese

*Kritische Phänomene* werden beobachtet, wenn die Fluktuationen in der Nähe des kritischen Punktes so stark anwachsen, daß ihre Wechselwirkung wesentlich wird. Man befindet sich dann im *kritischen Bereich*, dessen Ausdehnung um den kritischen Punkt durch das Ginzburg Kriterium nach § 2.6 abgeschätzt werden kann. In Messungen des Ordnungsparameters, der Suszeptibilität oder der Wärmekapazität treten *universelle Eigenschaften* hervor, vgl. § 1.1. Insbesondere beobachtet man nicht-klassische, d. h. von der Molekularfeldtheorie abweichende kritische Exponenten. Darüber hinaus findet man *Skalenverhalten* in der Ordnungsparameter-Korrelationsfunktion und in thermodynamischen Größen.

Zur Erklärung des Skalenverhaltens betrachten wir zunächst die vom Wellenvektor  $\vec{q}$  abhängige Korrelationsfunktion des Ordnungsparameters

$$\langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle \equiv G(q, \xi) \quad (3.1)$$

bei verschwindendem äußeren Feld  $h = 0$ . Ihre Abhängigkeit von der Temperatur wird durch die temperaturabhängige Korrelationslänge  $\xi$  ausgedrückt, für die hinreichend nahe  $T_c$  ein Potenzgesetz

$$\xi \simeq \text{const} |\tau|^{-\nu}; \quad \tau = (T - T_c)/T_c \quad (3.2)$$

angenommen wird. Der kritische Exponent  $\nu$  liegt für  $d = 3$  zumeist nahe  $\nu \sim 0.7$ . (In der Molekularfeldtheorie ist  $\nu = 1/2$ , vgl. § 2.3 und § 2.5.) Der Kürze halber gehen wir in diesem Abschnitt sofort davon aus, daß die kritischen Exponenten zu einer bestimmten Größe oberhalb und unterhalb  $T_c$  gleich sind.

Entscheidend ist nun, daß im kritischen Bereich die Funktion  $G(q, \xi)$  von den Variablen  $\xi$  und  $q$  nicht getrennt abhängt, sondern sich auf eine Funktion nur *einer* Variablen zurückführen läßt. (Der MF-Ausdruck (2.105) zeigt grundsätzlich bereits eine solche Form.) Diese Eigenschaft der Funktion  $G(q, \xi)$  ergibt sich aus der *Skalenhypothese*. Sie besagt, daß nahe  $T_c$  die Korrelationslänge  $\xi$  die einzige, hinsichtlich

der kritischen Phänomene relevante Längenskala darstellt. Die asymptotischen Gesetzmäßigkeiten nahe  $T_c$  sind zurückführbar auf die divergierende Korrelationslänge.

Bezüglich  $G(q, \xi)$  genügt zunächst die Schlußfolgerung, daß für den Wellenvektor  $q$  die Korrelationslänge als einzige Skala in Frage kommt. Somit läßt sich  $G(q, \xi)$  gemäß

$$\boxed{G(q, \xi) \simeq \xi^{2-\eta} g(q\xi)} \quad (3.3)$$

auf eine Skalenfunktion  $g(z)$ , mit dem dimensionslosen Argument  $z = q\xi$ , zurückführen. Zudem wird die Divergenz der Korrelationsfunktion bei  $q = 0$  durch einen Vorfaktor in Form einer Potenz von  $\xi$  ausgedrückt. Der Exponent  $\eta$  gibt Korrekturen des singulären Verhaltens bei  $q = 0$  gegenüber der Molekularfeld- oder Ginzburg-Landau-Theorie an. (Dort ist  $\eta = 0$ , wie man an (2.109) abliest).

Der Ausdruck (3.3) gilt asymptotisch für  $q \rightarrow 0$ ;  $\xi \rightarrow \infty$ . Hält man zunächst  $q \neq 0$  fest und betrachtet den Grenzfall  $\xi \rightarrow \infty$ , so muß die r.S. von (3.3) unabhängig von  $\xi$  werden. Dies impliziert  $g(z) \sim z^{-(2-\eta)}$  für  $z \gg 1$ , so daß

$$G(q, \infty) \sim q^{-(2-\eta)}; \quad T = T_c \quad (3.4)$$

Am kritischen Punkt existiert also *keine* ausgezeichnete Skala bezüglich  $q$ ; die  $q$ -Abhängigkeit befolgt deshalb ein Potenzgesetz.

Umgekehrt, betrachtet man  $\xi$  fest und  $q \rightarrow 0$ , so folgt aus dem Fluktuations-Dissipationstheorien (2.25), siehe auch (2.120),

$$\chi \propto G(0, \xi) \simeq \xi^{2-\eta} g(0) \quad (3.5)$$

wobei die Skalenfunktion  $g(z)$  für  $z \rightarrow 0$  in eine Konstante übergeht. Es zeigt sich, daß die Suszeptibilität sich verhält wie  $\chi \sim \xi^{2-\eta} \sim |\tau|^{-\nu(2-\eta)}$ . Nach Definition des Exponenten  $\gamma$  gilt  $\chi \sim |\tau|^{-\gamma}$ . Durch Gleichsetzen der Potenzen von  $|\tau|$  folgt ein erstes Skalengesetz

$$\gamma = (2 - \eta)\nu \quad (3.6)$$

Zur Form (3.3) sind noch die folgenden Bemerkungen angebracht. Offenbar erfüllt (3.3) eine verallgemeinerte Homogenitätseigenschaft,

$$G(q, \xi) = b^{2-\eta} G\left(bq, \frac{\xi}{b}\right) \quad (3.7)$$

mit einem beliebigen "Skalenfaktor"  $b > 0$ , auf die wir in § 3.3 zurückkommen. Für die ortsabhängige Korrelationsfunktion  $\langle \phi(\vec{x})\phi(0) \rangle \equiv \bar{G}(x, \xi)$  finden wir die Skaleneigenschaft

$$\begin{aligned} \bar{G}(x, \xi) &= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} G(q, \xi) e^{i\vec{q}\vec{x}} \\ &= \xi^{-d} \xi^{2-\eta} \int \frac{d^d z}{(2\pi)^d} g(z) e^{i\vec{z}\vec{x}/\xi} \\ &\equiv \xi^{2-\eta-d} \bar{g}\left(\frac{x}{\xi}\right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

so daß am kritischen Punkt

$$\bar{G}(x, \infty) \sim x^{d-2+\eta} \quad (3.9)$$

Als nächstes wird die vom äußeren Feld  $h$  abhängige freie Energie betrachtet. Die Dichte der freien Energie zerlegen wir in einen am kritischen Punkt regulären und einen singulären Anteil,  $f_h = f_{reg} + f_{sing}$ . Wir haben gesehen, daß nach der Skalenhypothese die Korrelationsfunktion gemäß (3.7) eine verallgemeinerte Homogenitätsrelation bezüglich der Variablen  $q$  und  $\xi$  bzw. bezüglich  $q$  und  $\tau = (T - T_c)/T_c$  erfüllt. Entsprechend wird für die freie Energie postuliert, daß der singuläre Anteil  $f_{sing}$  bezüglich  $\tau$  und  $h$  ebenfalls eine verallgemeinerte Homogenitätsrelation erfüllt (B. Widom, J. Chem. Phys. **43**, 3892, 3898 (1977)):

$$\boxed{f_{sing}(\tau, h) = b^{-d} f_{sing}(b^y \tau, b^x h)} \quad (3.10)$$

mit  $b > 0$  beliebig und zunächst unbekanntem kritischen Exponenten  $x$  und  $y$ .  $d$  bezeichnet die Dimension des Systems.

Heuristisch läßt sich (3.10) aus der in §3.2 dargelegten Kadanoff-Konstruktion begründen. (Ein um den Skalenfaktor  $b$  "vergrößertes" System hat die Korrelationslänge  $\xi' = \xi/b$  und entspricht dem ursprünglichen System mit reskalierten Variablen  $\tau' = b^y \tau$ ;  $h' = b^x h$ . Gleichzeitig besitzt es eine um den Faktor  $b^d$  vergrößerte Dichte der freien Energie.) Eine quantitative Begründung erfolgt durch die Renormierungsgruppentheorie.

Eine zu (3.10) äquivalente Form entsteht durch die Wahl  $b = |\tau|^{-1/y}$ , so daß

$$f_{sing} = |\tau|^{d/y} \tilde{f}_{\pm} \left( \frac{h}{|\tau|^{\Delta}} \right) \quad (3.11)$$

mit

$$\tilde{f}_{\pm}(z) = f_{sing}(\pm 1, z); \quad \Delta = \frac{x}{y} \quad (3.12)$$

Die beiden Vorzeichen beziehen sich auf Situationen  $T > T_c$  bzw.  $T < T_c$ .

Aus (3.11) können wir den Ordnungsparameter berechnen,

$$\begin{aligned} \phi &= -\frac{\partial f_{sing}}{\partial h} \\ &= |\tau|^{\beta} \tilde{\phi}_{\pm} \left( \frac{h}{|\tau|^{\Delta}} \right) \end{aligned} \quad (3.13)$$

wobei  $\tilde{\phi}_{\pm}(z) \equiv -d\tilde{f}_{\pm}/dz$  und

$$\beta = \frac{d}{y} - \Delta \quad (3.14)$$

Für  $h = 0$  und  $T > T_c$  ist  $\phi \equiv 0$ , so daß  $\tilde{\phi}_{+}(0) = 0$ , während  $\phi_{-}$  für  $h \rightarrow 0$  in eine nichtverschwindende Konstante übergeht. Für  $h \rightarrow 0$ ,  $T < T_c$ , verhält sich daher

der Ordnungsparameter wie  $\phi \sim (-\tau)^\beta$ , in Übereinstimmung mit der Definition (1.8), wobei nach (3.14) der Exponent  $\beta$  durch  $d$  und die ursprünglichen Exponenten  $x$  und  $y$  gegeben ist. (3.13) stellt die thermische Zustandsgleichung in Skalenform dar.

Nochmalige Differentiation nach  $h$  liefert

$$\frac{\partial \phi}{\partial h} \simeq |\tau|^{-\gamma} \tilde{\chi}_\pm \left( \frac{h}{|\tau|^\Delta} \right) \quad (3.15)$$

woraus wir die Nullfeld-Suszeptibilität  $\chi = (\partial \phi / \partial h)_{h=0} \sim |\tau|^{-\gamma}$  erhalten. Dabei ist  $\gamma$  gegeben durch

$$\gamma = \Delta - \beta \quad (3.16)$$

Die Auswertung der Zustandsgleichung bei  $T = T_c$  führt gemäß der Definition  $\phi \sim h^{1/\delta}$  auf den Exponenten  $\delta$ . Wird  $h \neq 0$  festgehalten, so muß die r.S. von (3.13) im Grenzfall  $\tau \rightarrow 0$  unabhängig von  $\tau$  werden. Es folgt, daß die beiden Skalenfunktionen  $\tilde{\phi}_\pm(z)$  für  $z \rightarrow \infty$  das gemeinsame asymptotische Verhalten  $\tilde{\phi}_\pm(z) \sim z^{\beta/\Delta}$  für  $z \gg 1$  zeigen. Daraus ergibt sich unmittelbar

$$\frac{1}{\delta} = \frac{\beta}{\Delta} \quad (3.17)$$

Schließlich berechnen wir aus (3.11) die Wärmekapazität bei  $h = 0$ ,

$$C \simeq -T_c^{-1} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} \left( |\tau|^{d/y} \right) \tilde{f}_\pm(0) \quad (3.18)$$

Dieser Ausdruck ist proportional zu  $|\tau|^{d/y-2}$ ; der Exponent  $\alpha$  ist somit gegeben durch

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y} \quad (3.19)$$

Alle in den thermodynamischen Größen auftretenden kritischen Exponenten  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  und  $\delta$  sind durch diese Überlegungen auf die Exponenten  $x$  und  $y$  zurückgeführt. Nach Elimination von  $\Delta$  und  $d/y$  entstehen die Skalenrelationen:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (3.20)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (3.21)$$

die bereits in § 1.1 genannt wurden.

Darüber hinaus zeigt die Kadanoff-Konstruktion, vgl. § 3.2, daß die Korrelationslänge  $\xi'$  in einem um den Faktor  $b$  "vergrößerten" System durch  $\xi' = \xi/b$  gegeben ist und gleichzeitig  $\xi' \sim |\tau'|^{-\nu} = |b^y \tau|^{-\nu}$  erfüllt. Es ist also  $1/b = b^{-y\nu}$  oder

$$y = \frac{1}{\nu} \quad (3.22)$$

Zusammen mit (3.19) haben wir neben (3.6), (3.20) und (3.21) eine vierte Skalenrelation

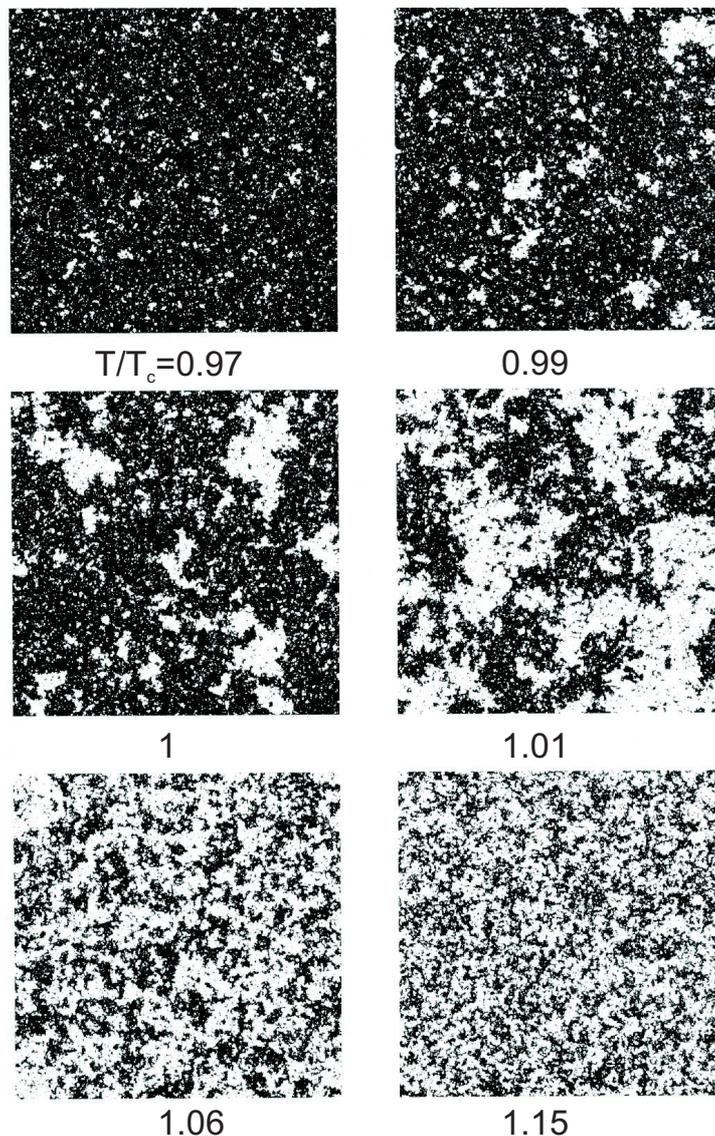
$$\alpha = 2 - d\nu \quad (3.23)$$

für die insgesamt 6 statischen Exponenten  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\nu$  und  $\eta$ .

## 3.2 Renormierung im Ortsraum

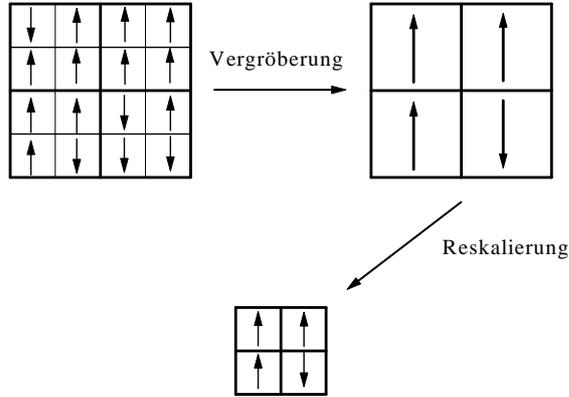
### Kadanoff–Transformation

Wir gehen von der Skalenhypothese aus und betrachten zur näheren Illustration in Abb. (3.1) Spinkonfigurationen eines Ising–Modells auf einem  $2d$  Quadratgitter mit



**Abbildung 3.1:** Typische (equilibrierte) Spinkonfigurationen eines  $2d$   $NN$ -Ising-Modells auf einem Quadratgitter der Kantenlänge  $L = 512$  bei verschiedenen Temperaturen in der Nähe des kritischen Punktes ( $h = 0$ ).

$NN$ -Wechselwirkung  $J > 0$  und verschwindendem äußeren Feld ( $h = 0$ ). Gezeigt sind Konfigurationen bei Temperaturen knapp oberhalb und unterhalb  $T_c$ . Qualitativ ist zu erkennen, wie sich die Größenverteilung von Clustern mit jeweils einer der beiden möglichen Spineinstellungen verändert, wenn die Temperatur variiert wird. Insbesondere wächst die typische Clustergröße, charakterisiert durch  $\xi$ , wenn  $T \rightarrow T_c$ .



**Abbildung 3.2:** Blockeinteilung eines  $2d$  Ising-Modells für  $b = 2$  nach Kadanoff.

Bei  $T_c$  existieren Cluster *aller* Größenordnungen, sofern man von mikroskopischen Längen (Abstand benachbarter Spins) und der endlichen Systemgröße absieht.

Bei Betrachtung dieser Spinkonfigurationen mit einer um den Faktor  $b > 1$  verringerten räumlichen Auflösung (z.B. vergrößert der Beobachter seinen Betrachtungsabstand um den Faktor  $b$ ) wird man der beobachteten Clusterverteilung die Korrelationslänge  $\xi' = \xi/b$  zuordnen. Da die Korrelationslänge als einzige relevante Längenskala nun verringert ist, entsteht das Abbild eines Systems, welches sich vom kritischen Punkt entfernt hat. Für  $T > T_c$  hat sich die scheinbare Temperatur erhöht bzw. die dimensionslose Kopplung  $K = J/k_B T$  verkleinert. Das Umgekehrte gilt für  $T < T_c$ . Am kritischen Punkt existiert *keine* charakteristische Längenskala ( $\xi = \infty!$ ). Ursprüngliches und “vergrößertes” System sind ununterscheidbar: das System ist *skaleninvariant*.

Diese Idee läßt sich formalisieren. Die nachstehend skizzierte schematische Vorgehensweise geht auf Kadanoff (Physics **2**, 263 (1966)) zurück. Eine für konkrete Rechnungen geeignete Implementierung dieser Idee bedarf jedoch weiterer Überlegungen bzw. Näherungen, siehe unten, sowie §3.3.

Das ursprüngliche Gitter wird in Blöcke mit je  $b^d$  Spins aufgeteilt, wie in Abb. (3.2) für  $b = 2$  gezeigt. Die Einstellung der  $b^d$  Spins des Blocks  $\alpha$  wird vergrößert repräsentiert durch den Blockspin  $\tilde{\sigma}_\alpha$ . Wenn  $\xi$  so groß ist, daß die meisten Spins innerhalb eines Blocks parallel gerichtet sind, so kann man im einfachsten Fall

$$\tilde{\sigma}_\alpha \simeq b^{-d} \sum_{i \in \alpha} \sigma_i \quad (3.24)$$

setzen, mit  $\tilde{\sigma}_\alpha \approx \pm 1$ . Aus dem ursprünglichen Hamiltonian  $H$  wird nun nach folgender Vorschrift ein neuer Hamiltonian  $H'$  konstruiert, der das vergrößerte System beschreibt und nur von den Blockspins  $\tilde{\sigma}_\alpha$  abhängt,

$$\sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H\{\sigma_i\}} \prod_{\alpha} \delta_{\tilde{\sigma}_{\alpha}, b^{-d} \sum_{i \in \alpha} \sigma_i} \equiv e^{-\beta H'\{\tilde{\sigma}_{\alpha}\}} \quad (3.25)$$

Summiert wird über alle Spinkonfigurationen, die mit einer vorgegebenen Konfiguration  $\{\tilde{\sigma}_{\alpha}\}$  der Blockspins verträglich sind. Die Gitterkonstante des Blockspinsystems beträgt zunächst  $a' = ba$ . Durch Verkleinerung aller Längen um den Faktor  $b$  wird jedoch die ursprüngliche Gitterkonstante  $a$  wieder hergestellt. Dann beschreibt  $H'$  ein Ising–Spinsystem auf dem ursprünglichen Gitter.

Gleichung (3.25) definiert die “Kadanoff–Transformation”  $\mathcal{R}_b$ ,

$$H \rightarrow H' = \mathcal{R}_b(H) \quad (3.26)$$

Transformationen zu verschiedenen Reskalierungsfaktoren  $b$  besitzen die Eigenschaft einer Halbgruppe

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{b=1} &= 1 \\ \mathcal{R}_b \mathcal{R}_{b'} &= \mathcal{R}_{bb'} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Entscheidend ist nun die Annahme, daß  $H'$  *dieselbe* Form besitzt wie  $H$ . Enthält  $H$  nur Paar–Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn, so erscheint es zunächst plausibel, daß auch in  $H'$  nur benachbarte Blockspins paarweise wechselwirken. Diese Annahme ist auf der Basis von (3.25) aber nicht wirklich korrekt. Vielmehr entstehen unter der Transformation (3.25) i.a. kompliziertere Kopplungen. Es ist daher notwendig, eine Klasse von  $H'$ s mit einem erweiterten Satz von Kopplungskonstanten zu betrachten, und eventuell entstehende zusätzliche Kopplungen abzuschneiden. Diese für konkrete Rechnungen wichtigen Aspekte wollen wir an dieser Stelle aber nicht weiter verfolgen.

Es sei also

$$-\beta H\{\sigma_i\} = K \sum_{(NN)} \sigma_i \sigma_j \quad (3.28)$$

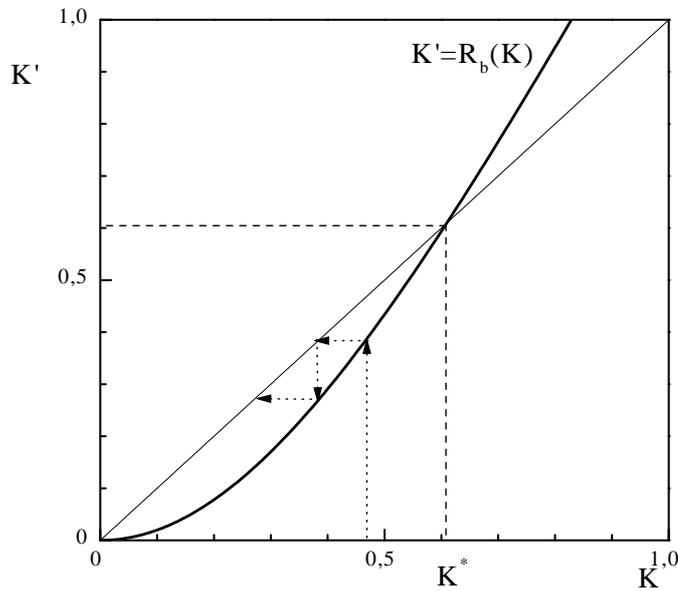
und wir nehmen vereinfachend an, daß

$$-\beta H'\{\tilde{\sigma}_{\alpha}\} = K' \sum_{(NN)} \tilde{\sigma}_{\alpha} \tilde{\sigma}_{\beta} \quad (3.29)$$

Dabei bedeutet  $\sum_{(NN)}$  eine Summation über alle  $NN$ –Paare von Spins. (3.25) reduziert sich dann auf eine Zuordnung zwischen den Kopplungskonstanten, die wir in der Form

$$K' = R_b(K) \quad (3.30)$$

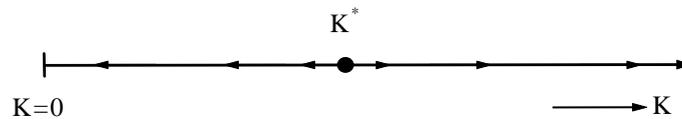
schreiben. Nach der obigen Diskussion ist folgende Eigenschaft von (3.25) bzw. (3.30) für alles weitere entscheidend. Der kritische Punkt ist durch Skaleninvarianz ausgezeichnet. Die Ununterscheidbarkeit des ursprünglichen vom vergrößerten System impliziert  $H' = H$  (bis auf höchstens eine additive Konstante), bzw.  $K' = K$ . Der



**Abbildung 3.3:** Schematische Abhängigkeit  $K' = R_b(K)$  nach (3.30) mit abstoßendem Fixpunkt  $K^*$ .

kritische Wert  $K^* = J/k_B T_c$  ist folglich Fixpunkt der Transformation (3.30). Wie in Verbindung mit Abb. (3.1) ausgeführt, bewegt man sich für  $K \neq K^*$  unter der Transformation (3.30) vom Fixpunkt weg, d.h.  $K < K^*$  (oder  $T > T_c$ ) impliziert  $K' < K$  und umgekehrt. Der Fixpunkt  $K^*$  ist also abstoßend.

Abb. (3.3) zeigt qualitativ das Verhalten der Kopplungskonstanten, wenn (3.30) iteriert wird. Trivialerweise stellen der wechselwirkungsfreie Fall  $K = 0$  sowie  $K = \infty$  (vollkommen ausgerichtete Spins) ebenfalls Fixpunkte dar, die attraktiv sind. Längs der  $K$ -Achse ergibt sich dann das in Abb. (3.4) gezeigte Flußdiagramm. In allgemei-



**Abbildung 3.4:** Flußdiagramm zu Abb. (3.3).

neren Fällen, wenn mehrere Kopplungskonstanten in  $H$  bzw.  $H'$  zu berücksichtigen sind, entstehen mehrdimensionale Flußdiagramme, vgl. §3.4.

Das prinzipielle Vorgehen von Renormierungsgruppen (RG)–Theorien wird aus dieser Art Überlegung bereits erkennbar. Die kritischen Exponenten sind, wie sich herausstellt, durch das Verhalten der am Fixpunkt  $K^*$  linearisierten Abbildung (3.25) bzw. (3.30) bestimmt. Wiederholte Anwendung (Iteration) dieser Abbildung führt vom kritischen Punkt weg in Bereiche der Kopplungskonstanten, die durch einfachere Theorien behandelt werden können. Verfolgt man die Iteration dann rückwärts, so können unter Umständen quantitative Aussagen im kritischen Bereich gewonnen werden.

Zur Illustration betrachten wir die Korrelationslänge  $\xi$ , die im NN–Ising–Modell nur eine Funktion von  $K$  ist,  $\xi = \xi(K)$ . Die Korrelationslänge  $\xi'$  im Blockspinsystem ist durch *dieselbe* Funktion gegeben,  $\xi' = \xi(K')$ , und erfüllt gleichzeitig  $\xi' = \xi/b$ . Der kritische Punkt ist gekennzeichnet durch

$$K = K' = K^* \Leftrightarrow \xi = \infty; \xi' = \infty \quad (3.31)$$

Bei bekanntem Zusammenhang  $K' = R_b(K)$  steht somit eine Funktionalgleichung für  $\xi(K)$  zur Verfügung. Zur Auswertung betrachten wir  $K$  hinreichend nahe  $K^*$  und linearisieren

$$R_b(K) \simeq R_b(K^*) + \lambda_b(K - K^*) = K^* + \lambda_b(K - K^*) \quad (3.32)$$

mit

$$\lambda_b = \left( \frac{dR_b(K)}{dK} \right)_{K^*} \quad (3.33)$$

Da der Fixpunkt abstoßend ist, gilt  $|\lambda_b| > 1$ . Der in Abb. (3.3) gezeigte typische Verlauf der Funktion  $R_b(K)$  entspricht  $\lambda_b > 1$ . Die Eigenschaft (3.27) überträgt sich auf  $\lambda_b$  gemäß

$$\lambda_b \lambda_{b'} = \lambda_{bb'} \quad (3.34)$$

Nehmen wir an, daß die Funktion  $\xi(K)$  für  $K \rightarrow K^*$  gemäß einem Potenzgesetz divergiert,

$$\xi(K) \sim |K - K^*|^{-\nu} \quad (3.35)$$

mit einem zu bestimmenden Exponenten  $\nu$ , so folgt:

$$\frac{\xi(K')}{\xi(K)} = \frac{\xi(R_b(K))}{\xi(K)} = \left| \frac{R_b(K) - K^*}{K - K^*} \right|^{-\nu} = \lambda_b^{-\nu} \quad (3.36)$$

Wegen  $\xi(K')/\xi(K) = b^{-1}$  finden wir für den kritischen Exponenten  $\nu$  den Wert

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_b} \quad (3.37)$$

Daß  $\nu$  unabhängig von  $b$  ist, wird durch (3.34) garantiert.

Je nach Art des Problems bieten sich alternativ zu (3.24) weitere Möglichkeiten zur Einführung von Blockspins  $\tilde{\sigma}_\alpha$  an, z.B. die Wahl von  $\tilde{\sigma}_\alpha$  nach der ‘Majoritätsregel’, Herausgreifen eines einzigen Spins aus jedem Block (Dezimierungsverfahren, siehe unten) etc. Im folgenden werden zwei Beispiele behandelt.

### 1d Ising–Modell: Dezimierung

Wie man schon vermuten kann, bietet das 1d Ising–Modell ein Beispiel, welches mit dem Dezimierungsverfahren exakt lösbar ist.

Gegeben sei ein Spinkette, bestehend aus  $N = 2^M$  Ising–Spins, mit

$$-\beta H\{\sigma_i\} = K \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (3.38)$$

Wir unterteilen die Kette in Zellen mit je zwei benachbarten Spins, siehe Abb. (3.5), und führen im Ausdruck für die Zustandssumme  $Z(K, N)$  die Summationen über  $\sigma_2, \sigma_4 \dots$  explizit aus. Es verbleibt

$$Z(K, N) = \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \dots} [\exp K(\sigma_1 + \sigma_3) + \exp(-K(\sigma_1 + \sigma_3))] \times [\exp K(\sigma_3 + \sigma_5) + \exp(-K(\sigma_3 + \sigma_5))] \times \dots \quad (3.39)$$

Folgende Identität läßt sich für  $\sigma = \pm 1, \sigma' = \pm 1$  leicht nachrechnen

$$e^{K(\sigma+\sigma')} + e^{-K(\sigma+\sigma')} = u(K)e^{K'\sigma\sigma'} \quad (3.40)$$

mit

$$K' = \frac{1}{2} \ln (\cosh 2K) \quad (3.41)$$

$$u(K) = 2\sqrt{\cosh 2K} \quad (3.42)$$

Denn für  $\sigma = \sigma'$  findet man

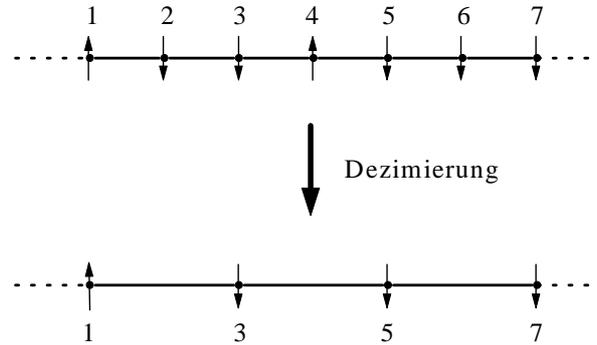
$$e^{2K} + e^{-2K} = u(K)e^{K'}$$

und für  $\sigma = -\sigma'$

$$2 = u(K)e^{-K'}$$

Division und Multiplikation der letzten beiden Gleichungen liefert (3.41) und (3.42). Der nur noch von  $\sigma_1, \sigma_3, \dots$  abhängige transformierte Hamiltonian hat demnach die Gestalt

$$-\beta H'\{\sigma_i\} = \frac{N}{2} \ln u(K) + K' \sum_{i=1,3,\dots} \sigma_i \sigma_{i+2} \quad (3.43)$$



**Abbildung 3.5:** Verfahren der Dezimierung bei der  $1d$  Spinkette. Über Spins mit geradem Index  $i$  wird jeweils wegsummiert.

Neben einem Wechselwirkungsterm derselben Form wie in (3.38) tritt eine additive Konstante auf. (Genau genommen hat man also einen Hamiltonian mit zwei Parametern zu betrachten; dies führt auf eine 2-parametrische, aber in sich entkoppelte Rekursion.)

(3.43) liefert sofort für die Zustandssumme die Bedingung

$$Z(K, N) = (u(K))^{N/2} Z\left(K', \frac{N}{2}\right) \quad (3.44)$$

Die für  $b = 2$  gewonnene Funktion  $K' = R_b(K)$  nach (3.41) zeigt nur die beiden trivialen Fixpunkte  $K = 0$  (anziehend) und  $K = \infty$  (abstoßend); in deren Nähe gilt

$$K' \simeq \begin{cases} K^2 & \text{für } K \rightarrow 0 \\ K - \frac{1}{2} \ln 2 & \text{für } K \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.45)$$

(3.45) erlaubt es, das asymptotische Verhalten der Korrelationslänge  $\xi$  für  $T \rightarrow 0$  ( $K \rightarrow \infty$ ) abzulesen. Die Bedingung  $\xi(K') = \frac{1}{2}\xi(K)$  führt für  $K \rightarrow \infty$  auf die Gleichung

$$\xi\left(K - \frac{1}{2} \ln 2\right) = \frac{1}{2}\xi(K), \quad (3.46)$$

die durch die Exponentialfunktion  $\xi(K) \sim e^{2K}$  gelöst wird. Die Korrelationslänge divergiert also exponentiell für  $T \rightarrow 0$ . Diese asymptotische Form für  $\xi(K)$  stimmt mit dem Ergebnis aus der Transfermatrix-Methode überein.

Die additive Konstante in (3.43) bestimmt die freie Energie  $F(K, N)$ . Es sei

$$f(K) = -\frac{k_B T}{N} \ln Z(K, N) = \frac{1}{N} F(K, N) \quad (3.47)$$

die freie Energie pro Spin, die im thermodynamischen Limes nicht von  $N$  abhängt. Bildet man von (3.44) den Logarithmus und dividiert durch  $N$ , so entsteht

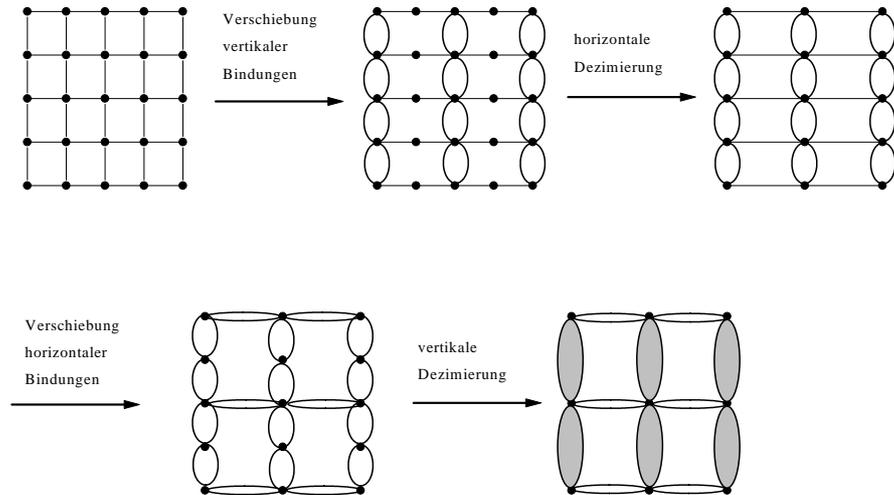
$$\begin{aligned}
-\beta f(K) &= \frac{1}{2}(\ln u(K) - \beta f(K')) \\
&= \frac{1}{2}(\ln 2 + K' - \beta f(K'))
\end{aligned} \tag{3.48}$$

wobei wir nach (3.42)  $u(K) = 2e^{K'}$  verwendet haben. (3.48) eignet sich, von hohen Temperaturen herkommend,  $f(K)$  für beliebige  $K$  iterativ zu bestimmen. Als Startwert bei sehr hohen Temperaturen ( $K' \ll 1$ ) genügt die Näherung nicht-wechselwirkender Spins,  $f(K') \simeq -k_B T \ln 2$ . Auf diese Weise kann man alternativ zur Transfermatrix-Methode genaue Werte für die freie Energie bei beliebigen Temperaturen erhalten.

### 2d Ising-Modell: Migdal-Kadanoff Renormierung.

Ein anderes einfaches, aber vielseitig einsetzbares Verfahren der Ortsraumrenormierung stammt von Migdal und Kadanoff. Wir beschreiben es anhand des  $2d$  Ising-Modells auf dem Quadratgitter.

Ausgehend von einem Gitter mit  $NN$ -Kopplungen  $K_y$  und  $K_x$  in vertikaler bzw. horizontaler Richtung wird eine Transformation  $b = 2$  in zwei Schritten bewerkstelligt, vgl. Abb. (3.6).



**Abbildung 3.6:** Schritte bei der Migdal-Kadanoff Renormierung.

1. Schritt: Jede zweite vertikale Bindung  $K_y$  wird nach rechts verschoben und mit der benachbarten Bindung zusammengefaßt zu  $\tilde{K}_y = 2K_y$ . Über die nunmehr horizontal gekoppelten Spins wird wegsummiert mit Hilfe des Dezimierungsverfahrens in  $d = 1$ . Es entstehen neue horizontale Bindungen  $\tilde{K}_x = \frac{1}{2} \ln(\cosh 2K_x)$ , vgl. (3.41)
2. Schritt: Jede zweite horizontale Bindung  $\tilde{K}_x$  wird nach oben verschoben und mit der benachbarten zusammengefaßt zu  $K'_x = 2\tilde{K}_x$ . Über die nun noch

vertikal gekoppelten Spins wird analog zum 1. Schritt wegsummiert. Es entstehen neue vertikale Kopplungen  $K'_y = \frac{1}{2} \ln \cosh 4K_y$ .

Der Nachteil ist, daß  $K'_x \neq K'_y$ , wenn anfänglich  $K_x = K_y = K$ . Die Unterschiede sind aber nicht bedeutend; als renormierte Kopplung  $K'$  kann man das arithmetische Mittel heranziehen. Zusammengefaßt ergibt sich

$$K' = \frac{1}{2}(K'_x + K'_y) \quad (3.49)$$

mit

$$K'_x = \ln(\cosh 2K)$$

$$K'_y = \frac{1}{2} \ln(\cosh 4K)$$

Mit dieser intuitiven Konstruktion gelingt es, für das  $2d$  Ising-Modell eine brauchbare, 1-parametrische Renormierung durchzuführen. Wie Abb. (3.7) zeigt, erhält man rechnerisch nach (3.49) einen Zusammenhang  $K' = R(K)$  der in Abb. (3.3) gezeigten Art. Der nicht-triviale Fixpunkt liegt bei etwa  $K^* \simeq 0.43$ . Dies entspricht  $k_B T \simeq 2.33J$ , ein Wert, der nur wenig über dem genauen Wert  $k_B T \simeq 2.273J$  aus der Onsager-Lösung liegt. Nach (3.37) findet man einen kritischen Exponenten  $\nu \simeq 1.39$ , der im Vergleich zur MF-Theorie in die richtige Richtung verschoben ist; exakt gilt  $\nu = 1$ . Wichtig sind nicht so sehr die genauen Zahlenwerte der erhaltenen Größen. Bedeutsam ist die Tatsache, ein Verfahren zu haben, welches sich ohne weiteres auch auf das

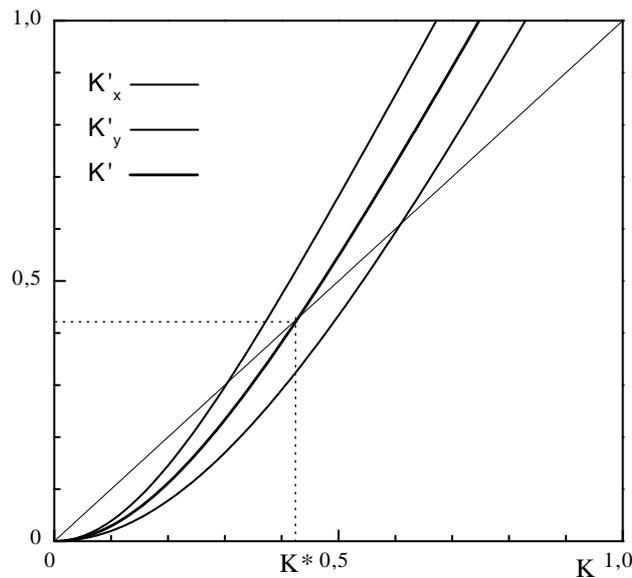


Abbildung 3.7:  $K'$  in Abhängigkeit von  $K$  nach (3.49).

3d Ising-Modell sowie auf allgemeinere Modelle (z. B. Potts-Modell) übertragen läßt und die korrekten Trends in der  $d$ -Abhängigkeit der kritischen Exponenten wiedergibt. Kritische Phänomene an Oberflächen wurden ebenfalls mit der Migdal-Kadanoff Renormierung behandelt (R. Lipowsky, H. Wagner, Z. Phys. B - Cond. Mat. **42**, 355 (1981)).

### Freie Energie

Grundsätzlich liefert die RG-Transformation unter Mitnahme einer additiven Konstanten einen neuen Hamiltonian der Form

$$-\beta H' = Nb^{-d}u(K) - \beta H(K', Nb^{-d}) \quad (3.50)$$

wenn  $H(K, N)$  den ursprünglichen Hamiltonian für  $N$  Spins bezeichnet, vgl. (3.43) im Fall  $d = 1; b = 2$ . Dies bedeutet

$$Z(K, N) = (u(K))^{Nb^{-d}} Z(K', Nb^{-d}) \quad (3.51)$$

Die freie Energie pro Spin erfüllt also die Rekursion

$$-\beta f(K) = b^{-d}(\ln u(K) - \beta f(K')) \quad (3.52)$$

Während  $u(K)$  lokal definiert ist und deswegen für alle  $K$  regulär ist, entwickelt  $f(K)$  aufgrund der Rekursion hinsichtlich  $K$  einen am kritischen Punkt singulären Anteil,  $f(K) = f_{reg}(K) + f_{sing}(K)$ , wobei  $f_{sing}(K)$  letztlich durch  $u(K)$  bestimmt ist. Wegen  $u(K)$  regulär kann man davon ausgehen, daß  $f_{sing}(K)$  der Gleichung

$$f_{sing}(K) = b^{-d}f_{sing}(K') \quad (3.53)$$

genügt (vgl. Th. Niemeijer, J.M.J. van Leeuwen, in "Phase Transitions and Critical Phenomena **6**", hrsg. v. C. Domb, M.S. Green (Academic Press London, 1976) Seite 425ff.). Die l.S. stellt die freie Energie pro Spin des ursprünglichen Systems dar. Multipliziert mit  $b^d$  ergibt dies gerade die freie Energie  $f_{sing}(K')$  pro Blockspin im Blockspinsystem. Aus dieser Skaleneigenschaft von  $f_{sing}(K)$  erhält man eine Aussage zum kritischen Exponenten  $\alpha$ . Mit dem Ansatz

$$f_{sing}(K) \sim |K - K^*|^n \quad (3.54)$$

für  $K$  hinreichend nahe  $K^*$  findet man

$$\begin{aligned} |K - K^*|^n &= b^{-d}|K' - K^*|^n \\ &\simeq b^{-d}|\lambda_b(K - K^*)|^n \end{aligned} \quad (3.55)$$

mit  $\lambda_b = (dK'/dK)_{K^*}$ . Dies führt unmittelbar auf  $n = d(\ln b / \ln \lambda_b)$  oder  $n = d\nu$ , wenn wir (3.37) verwenden. Andererseits ergibt 2-maliges Differenzieren von (3.54) nach  $T$  als Exponenten für die spezifische Wärme  $\alpha = 2 - n$ . Zusammengefaßt finden wir die von (3.23) her bekannte Skalenrelation

$$2 - \alpha = d\nu \quad (3.56)$$

In der Tat drückt (3.53) in Verbindung mit  $K' - K^* = \lambda_b(K - K^*)$ ;  $\lambda_b = b^y$  (wobei  $y = 1/\nu$ ) gerade die postulierte Homogenitätsrelation (3.10) für die freie Energie im Fall  $h = 0$  aus. Die vorstehenden Überlegungen lassen sich natürlich auch auf den Fall  $h \neq 0$  ausdehnen.

### 3.3 Renormierung im Impulsraum

Von der GL–Theorie ( $O(n)$ –Modell) ausgehend hat K.G. Wilson (siehe K.G. Wilson, J. Kogut, Phys. Rep. **12**, 75 (1974) sowie M.E. Fisher, Rev. Mod. Phys. **70**, 653 (1998)) gezeigt, daß in der Nähe der marginalen Raumdimension  $d^* = 4$ , vgl. §2.6, die kritischen Exponenten sich nach Potenzen von  $\epsilon = 4 - d$  entwickeln lassen. In 1. Ordnung bzgl.  $\epsilon$  lassen sich die Rechnungen mit nicht allzu großem Aufwand durchführen. Wichtig ist, daß in dieser Ordnung die nach heutigem Wissen auch in  $d = 3$  korrekte Fixpunktstruktur bereits sichtbar wird.

Die Renormierung bezieht sich hier auf die Parameter im GL–Funktional. In der diesbezüglichen Literatur ist es üblich, in Anlehnung an §2.1 anstelle  $\Delta F[\phi]$  die Bezeichnung  $H[\phi]$  zu verwenden.

Es sei also das GL–Funktional gegeben durch

$$H[\phi] = \int_V d^d x \left[ \frac{r}{2} (\phi(\vec{x}))^2 + u (\phi(\vec{x}))^4 + \frac{\kappa}{2} (\vec{\nabla} \phi(\vec{x}))^2 \right] \quad (3.57)$$

Einsetzen der Fourier–Darstellung für den Ordnungsparameter

$$\phi(\vec{x}) = L^{-d/2} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{x}} \phi_{\vec{q}} \quad (3.58)$$

$$|\vec{q}| < \Lambda$$

$$\phi_{\vec{q}} = L^{-d/2} \int_V d^d x \phi(\vec{x}) e^{-i\vec{q}\vec{x}} \quad (3.59)$$

ergibt

$$H[\phi] = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} (r + \kappa q^2) |\phi_{\vec{q}}|^2 + u L^{-d} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3, \vec{q}_4} \phi_{\vec{q}_1} \phi_{\vec{q}_2} \phi_{\vec{q}_3} \phi_{\vec{q}_4} \delta_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4, 0} \quad (3.60)$$

$$|\vec{q}| < \Lambda \quad |\vec{q}_i| < \Lambda$$

Während der erste Term bereits von §2.5 her bekannt ist, beschreibt der zweite Term die Wechselwirkung der Amplituden  $\phi_{\vec{q}}$  untereinander. Hinsichtlich der freien Energie liefert diese Theorie im Gegensatz zur Ortsraumrenormierung nur den singulären Anteil  $\Delta F_{sing}(T, V) = -k_B T \ln Z_{sing}$ , wobei  $Z_{sing}$  durch (2.88) gegeben ist.

Die Idee ist wiederum, Ordnungsparameter–Fluktuationen auf kleinen Längenskalen auszuintegrieren; der transformierte Hamiltonian  $H'$  soll möglichst wieder auf die gleiche Form gebracht werden wie  $H$ , jedoch mit geänderten Parametern  $r'$ ,  $u'$ ,  $\kappa'$ . Zur Vereinfachung der Transformationsformeln für  $r, u, \kappa$  wird dann noch die Freiheit ausgenutzt, auch den Ordnungsparameter umzuskalieren. Insgesamt besteht die RG–Transformation aus drei Teilschritten, vgl. Abb. (3.8):

1. Schritt: Kadanoff–Transformation im Impulsraum

In (2.88) wird über alle Amplituden  $\phi_{\vec{q}}$  zum  $q$ –Intervall  $\Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda$ ;  $b > 1$ ; wegintegriert:

$$\int_{\Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda} \prod_{\vec{q}} d(\text{Re}\phi_{\vec{q}})d(\text{Im}\phi_{\vec{q}})e^{-\beta H[\phi]} \equiv e^{-\beta H'[\phi]} \quad (3.61)$$

Der so definierte Hamiltonian  $H'$  enthält also nur noch Amplituden  $\phi_{\vec{q}}$  mit  $|\vec{q}| < \Lambda/b$ .

Offensichtlich erfüllt die Transformation  $\mathcal{R}_b$ , definiert durch  $H' = \mathcal{R}_b(H)$ , wiederum die Halbgruppeneigenschaft (3.27). Für die Zustandssumme (2.88) verbleibt der Ausdruck

$$Z_{sing} = \prod_{\substack{\vec{q} \\ |\vec{q}| < \Lambda/b}} \int d(\text{Re}\phi_{\vec{q}})d(\text{Im}\phi_{\vec{q}})e^{-\beta H'\{\phi_{\vec{q}}\}} \quad (3.62)$$

2. Schritt: Reskalierung der Wellenvektoren und Längen  
Anstelle der Wellenvektoren  $\vec{q}$  werden die Variablen

$$\vec{q}' = b\vec{q} \quad (3.63)$$

eingeführt, die dem *ursprünglichen* "Cutoff"  $\Lambda$  unterliegen,  $|\vec{q}'| < \Lambda$ . Die größere "Verdünnung" der Punkte  $\vec{q}'$  im Impulsraum bedingt aber ein verkleinertes System, denn es ist jetzt  $\vec{q}' = 2\pi\vec{n}/L'$  ( $\vec{n}$  ganzzahliger Vektor), mit

$$L' = L/b \quad (3.64)$$

3. Schritt: Reskalierung der Amplituden  $\phi_{\vec{q}}$   
Zweckmäßigerweise (siehe unten) macht man von der weiteren Freiheit Gebrauch, den Ordnungsparameter mit konstanten Faktoren versehen zu können. Mittels

$$\phi_{\vec{q}} = \zeta_b \phi'_{b\vec{q}} \quad (3.65)$$

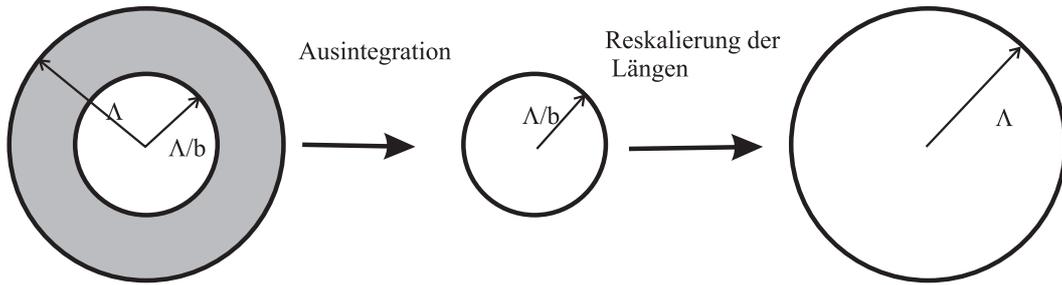
werden neue Amplituden  $\phi'_{\vec{q}'}$  als Variablen in  $H'$  eingeführt.

Die Frage ist, ob mit diesen Transformationen sich  $H'$  auf dieselbe Form bringen läßt wie die Funktion  $H = H(\{\phi_{\vec{q}}\}, r, u, \kappa, L)$ , mit jedoch geänderten Landau-Parametern  $r', u', \kappa'$  und der geänderten Systemgröße  $L'$ . Zu prüfen ist also, ob

$$H' = H(\{\phi'_{\vec{q}'}\}, r', u', \kappa', L') \quad (3.66)$$

Es zeigt sich, daß für Dimensionen  $d$  in der Nähe von  $d^* = 4$  die Bedingung (3.66) sich tatsächlich erfüllen läßt. Die Parameter  $r', u', \kappa'$  gehen dabei durch eine nichtlineare Transformation aus  $r, u, \kappa$  hervor. Üblicherweise wählt man in (3.65)  $\zeta_b$  so, daß  $\kappa' = \kappa$ . Dies vereinfacht die Transformation, die jetzt nur noch  $r$  und  $u$  betrifft:

$$\begin{pmatrix} r' \\ u' \end{pmatrix} = R_b \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix} \quad (3.67)$$



**Abbildung 3.8:** Illustration der Renormierungsschritte 1 und 2 im Impulsraum

Die Idee ist nun, einen nicht-trivialen Fixpunkt von (3.67) zu finden und analog (3.32)  $R_b$  in der Nähe des Fixpunkts zu linearisieren. Die kritischen Exponenten ergeben sich aus den Eigenwerten dieser linearisierten Transformation  $R_b^{(l)}$ . Ganz allgemein gesprochen sind die kritischen Exponenten durch die Eigenschaften der Transformation  $R_b$  bestimmt, nicht durch die ursprünglichen Landau-Parameter. Damit wird die Universalität der kritischen Exponenten verständlich: Die Abbildung  $R_b$  ist für eine ganze Klasse von Systemen zuständig, die alle durch ein GL-Funktional der gleichen Form beschrieben werden.

Sei also  $(r^*, u^*)$  ein nicht-trivialer Fixpunkt von (3.67),

$$\begin{pmatrix} r^* \\ u^* \end{pmatrix} = R_b \begin{pmatrix} r^* \\ u^* \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

Durch wiederholte Anwendung der Transformation  $R_b$  auf beliebige Punkte der  $(r, u)$ -Ebene ergibt sich ein "Flußdiagramm" der später in Abb. (3.9) dargestellten Art. Den Einzugsbereich des Fixpunkts bezeichnet man allgemein als "kritische Fläche" dieses Fixpunkts. Im vorliegenden Modell erweist sich die kritische Fläche als eine 1-dimensionale Punktmenge.

Alles weitere stützt sich auf die folgende Hypothese:

- i) Der Fixpunkt entspricht einem skaleninvarianten System, also einem System, welches sich an seinem kritischen Punkt befindet ( $\xi = \infty$ ).
- ii) Alle Systeme auf der kritischen Fläche befinden sich an ihrem kritischen Punkt. Denn bei fortgesetzter Anwendung von (3.67) geht die anfängliche Korrelationslänge  $\xi$  über in  $\xi/b$ ;  $\xi/b^2$ ;  $\xi/b^3 \dots$ . Diese Folge strebt aber zum Fixpunkt hin gegen Unendlich, so daß auch anfangs  $\xi = \infty$ . Gleichzeitig ist zu erkennen, daß die wirkliche kritische Temperatur, die wir im folgenden mit  $T_{crit}$  bezeichnen, im Gegensatz zu §1.2 im allgemeinen bei einem nicht-verschwindenden  $r$  auftritt, welches von  $u$  abhängt.

Wir führen nun die um den Fixpunkt linearisierte Transformation  $R_b^{(l)}$  ein,

$$R_b \begin{pmatrix} r^* + \delta r \\ u^* + \delta u \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} r^* \\ u^* \end{pmatrix} + R_b^{(l)} \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta u \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

für hinreichend kleine  $\delta r, \delta u$ .  $R_b^{(l)}$  wird repräsentiert durch eine  $2 \times 2$ -Matrix mit Eigenwerten  $\lambda_\alpha(b)$ ;  $\alpha = 1, 2$ . Die Eigenschaft  $R_b^{(l)} R_{b'}^{(l)} = R_{bb'}^{(l)}$  überträgt sich auf die Eigenwerte

$$\lambda_\alpha(b) \lambda_\alpha(b') = \lambda_\alpha(bb'). \quad (3.70)$$

Folglich

$$\lambda_\alpha(b) = b^{y_\alpha} \quad (3.71)$$

Es wird sich später herausstellen, daß der mit  $\lambda_1$  bezeichnete größere Eigenwert  $\lambda_1 > 1$  erfüllt, während  $\lambda_2 < 1$ , bzw.  $y_1 > 0$  und  $y_2 < 0$ . Die zugehörigen Eigenvektoren  $\mathbf{e}_1$  und  $\mathbf{e}_2$  geben in der  $(r, u)$ -Ebene die Richtungen an, längs deren der Fixpunkt abstoßend bzw. anziehend wirkt, siehe Abb. (3.9)

### Korrelationslänge

Betrachten wir nun ein System mit  $T$  nahe  $T_{crit}$ . In der  $(r, u)$ -Ebene wird es durch einen Punkt nahe der kritischen Fläche repräsentiert. Mehrmalige Anwendung der Transformation (3.67) führt den Systempunkt zunächst in eine Umgebung des Fixpunktes, innerhalb der  $R_b$  durch die linearisierte Transformation  $R_b^{(l)}$  ersetzt werden kann. Die Abweichungen vom Fixpunkt sind für  $T$  hinreichend nahe  $T_{crit}$  linear in  $T - T_{crit}$ , so daß wir schreiben können  $(\delta r, \delta u) \simeq (T - T_{crit})(\delta \bar{r}, \delta \bar{u})$ . Fortgesetzte,  $n$ -malige Anwendung von  $R_b^{(l)}$  ergibt

$$\begin{aligned} \left( R_b^{(l)} \right)^n \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta u \end{pmatrix} &= (T - T_{crit})(\lambda_1^n \mathbf{e}_1 c_1 + \lambda_2^n \mathbf{e}_2 c_2) \\ &\simeq (T - T_{crit}) \lambda_1^n \mathbf{e}_1 c_1 \end{aligned} \quad (3.72)$$

$c_1$  und  $c_2$  bezeichnen die Projektionen von  $(\delta \bar{r}, \delta \bar{u})$  auf  $\mathbf{e}_1$  bzw.  $\mathbf{e}_2$ . Für  $n \gg 1$  ist der Term in (3.72) proportional zu  $\lambda_2^n$  (wegen  $|\lambda_2| < 1$ ,  $|\lambda_1| > 1$ ) vernachlässigbar. Wesentlich für die Fortsetzung der Trajektorie ist also nur der Eigenvektor  $\mathbf{e}_1$ . Allgemein bezeichnet man Parameter im GL-Hamiltonian, die unter  $(R_b)^n$  sich mit Eigenwerten  $|\lambda_\alpha| > 1$  transformieren und sich deshalb vom Fixpunkt wegbewegen, als *relevant*. Die zugehörigen Exponenten  $y_\alpha > 0$  ergeben unmittelbar die kritischen Exponenten. Andernfalls, wenn  $|\lambda_\alpha| < 1$ , so sind die betreffenden Parameter *irrelevant* bzgl. der kritischen Exponenten. Auf nicht-universelle Eigenschaften üben sie dennoch Einfluß aus. Der Parameter  $r$ , dessen  $T$ -Abhängigkeit auf den Faktor  $T - T_{crit}$  in (3.72) führt, ist relevant.

Das singuläre Verhalten der Korrelationslänge sei nun durch die Funktion  $\xi = \xi(T - T_{crit})$  ausgedrückt. Nach (3.72) wird unter der Transformation  $R_b^{(l)}$  der Faktor  $T - T_{crit}$  überführt in  $\lambda_1(T - T_{crit})$ . Die Korrelationslänge  $\xi$  im transformierten System erfüllt also

$$\xi' = \xi(\lambda_1(T - T_{crit})) \stackrel{!}{=} \frac{1}{b} \xi(T - T_{crit}) \quad (3.73)$$

Diese Funktionalgleichung läßt sich durch ein Potenzgesetz

$$\xi \sim |T - T_{crit}|^{-\nu} \quad (3.74)$$

erfüllen. Einsetzen in (3.73) ergibt

$$\left| \frac{\lambda_1(T - T_{crit})}{T - T_{crit}} \right|^{-\nu} = \frac{1}{b} \quad (3.75)$$

oder, mit (3.71),

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_1} = \frac{1}{y_1} \quad (3.76)$$

Zu bemerken ist, daß nach Vernachlässigung des Terms  $\propto \lambda_2^n$  in (3.72) nur *ein* Term auftritt, der mit einem Eigenwert  $> 1$  verbunden ist. Die Überlegung, die zum Ergebnis (3.76) führt, ist deshalb der 1-Parameter-Renormierungstheorie in §3.4 völlig analog.

### Skaleneigenschaft der Korrelationsfunktion.

Um alle zu transformierenden Parameter kenntlich zu machen, schreiben wir für die Korrelationsfunktion

$$\langle |\phi_{\bar{q}}|^2 \rangle \equiv G(q, r, u, L) \quad (3.77)$$

Die Korrelationsfunktion im transformierten System,  $\langle |\phi'_{\bar{q}}|^2 \rangle$ , wird mit  $H'$  berechnet, welches in den Variablen  $\phi_{\bar{q}'}$  dieselbe Form hat wie  $H$  in Abhängigkeit von  $\phi_{\bar{q}}$ . Folglich

$$\langle |\phi'_{\bar{q}}|^2 \rangle = G(q', r', u', L') \quad (3.78)$$

Wegen  $\phi_{\bar{q}} = \zeta_b \phi'_{b\bar{q}}$  erhalten wir die Relation

$$G(q, r, u, L) = \zeta_b^2 G(bq, r', u', L') \quad (3.79)$$

Zunächst betrachten wir ein unendlich ausgedehntes System,  $L \rightarrow \infty$ , so daß das Argument  $L$  in (3.79) entfällt. Sodann spezialisieren wir auf  $T = T_{crit}$ . Da wir uns auf der kritischen Fläche befinden, geht (3.79) nach genügend vielen Iterationen über in  $G(q, r^*, u^*) = \zeta_b^2 G(bq, r^*, u^*)$ . Die Konstanten  $r^*, u^*$  können wir in der Notation streichen, so daß am kritischen Punkt sich (3.79) schließlich auf

$$G(q) = \zeta_b^2 G(bq) \quad (3.80)$$

reduziert. Diese Gleichung wird durch ein Potenzgesetz in  $q$  erfüllt,

$$G(q) \sim \frac{1}{q^{2-\eta}} \quad (3.81)$$

welches den kritischen Exponenten  $\eta$  definiert, siehe auch (3.4). (In der Ornstein–Zernike–Theorie (§2.5) ist  $\eta = 0$ .) Die r.S. von (3.80) ergibt den Faktor  $\zeta_b^2(bq)^{-2+\eta}$ . Gleichsetzen der Koeffizienten zu  $q^{-2+\eta}$  auf beiden Seiten stellt die Verbindung her zwischen dem Reskalierungsfaktor für die Ordnungsparameter–Amplituden und dem kritischen Exponenten  $\eta$ ,

$$\zeta_b = b^{1-\eta/2} \quad (3.82)$$

Nun betrachten wir  $T$  ungleich, aber sehr nahe  $T_{crit}$ . Dabei gehen wir so vor, wie bei (3.72) beschrieben. (3.79) wird ausgewertet für

$$\begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^* \\ u^* \end{pmatrix} + const.(T - T_{crit})\mathbf{e}_1 \quad (3.83)$$

$$\begin{pmatrix} r' \\ u' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r^* \\ u^* \end{pmatrix} + const.\lambda_1(T - T_{crit})\mathbf{e}_1 \quad (3.84)$$

In die Konstante geht ein, wie oft transformiert werden mußte, um sich auf dem vom Fixpunkt in Richtung  $\mathbf{e}_1$  weglaufernden Ast der Trajektorie zu befinden. Für ein gegebenes System kann mittels (3.83) die Abhängigkeit in (3.79) von  $r$  und  $u$  durch  $T - T_{crit}$  und nachfolgend durch  $\xi$  ausgedrückt werden. Die so entstehende Funktion  $G(q, \xi)$  erfüllt wegen (3.79)

$$G(q, \xi) = \zeta_b^2 G\left(bq, \frac{\xi}{b}\right) \quad (3.85)$$

Dabei wurden die Parameter  $r'$  und  $u'$  auf der r.S. von (3.79) mittels (3.84) in gleicher Weise durch  $\xi' = \xi/b$  ausgedrückt, vgl. (3.73). Wählen wir  $b = \xi$  ( $\xi$  ist wie in der gesamten Theorie auf eine molekulare Länge bezogen) und verwenden (3.82), so folgt die Skaleneigenschaft

$$G(q, \xi) = \xi^{2-\eta} g(q\xi) \quad (3.86)$$

mit der Skalenfunktion  $g(z) = G(z, 1)$ . Die Abhängigkeit der Korrelationsfunktion von den Variablen  $q$  und  $T - T_{crit}$  wird durch diese Relation auf eine Funktion nur *einer* Variablen zurückgeführt. Ihrer Herleitung nach gilt diese Skalenrelation asymptotisch für  $T \rightarrow T_{crit}$ ,  $q \rightarrow 0$ ,  $q\xi = \mathcal{O}(1)$ . Damit ist der Anschluß an § 3.1 erreicht; die Folgerungen (3.3) und (3.6) aus der Skalenhypothese hinsichtlich der Korrelationsfunktion  $G(q, \xi)$  sind hiermit durch die RG–Theorie bestätigt.

Schließlich kommen wir zurück auf Systeme endlicher Ausdehnung  $L$ . Wir beschränken uns auf  $T = T_{crit}$  und definieren  $G(q, r^*, u^*, L) \equiv G_L(q)$ . Wegen  $L' = L/b$  ergibt sich offenbar aus (3.79) mit  $b = L$

$$G_L(q) = L^{2-\eta} \tilde{g}(qL) \quad (3.87)$$

Im Vergleich zu (3.86) kann man dies folgendermaßen interpretieren. In einem System der Ausdehnung  $L$  kann die Korrelationslänge nicht größer werden als  $L$ , so daß de

facto in (3.86)  $\xi$  durch  $L$  ersetzt wird. Solche “finite-size scaling” Relationen spielen bei der numerischen Simulation des kritischen Verhaltens eine zentrale Rolle. Mit ihrer Hilfe gelingt es, aus Simulationen zu unterschiedlichen Systemgrößen auf den Grenzfall  $L \rightarrow \infty$  mit vernünftiger Genauigkeit zu extrapolieren.

Aus der gesamten Diskussion wird klar, in welcher Weise die RG-Theorie ein Verständnis des Ursprungs von Universalität und Skaleneigenschaften herbeiführt.

### 3.4 Gaußsches Modell, $\epsilon$ -Entwicklung

Das Gaußsche Modell ist definiert durch den GL-Hamiltonian

$$H[\phi] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{q} \\ |\vec{q}| < \Lambda}} (r + \kappa q^2) |\phi_{\vec{q}}|^2 \quad (3.88)$$

der aus (3.60) hervorgeht, indem man  $u = 0$  setzt. Dieses Modell ist exakt lösbar, vgl. §2.5. Doch ist es nützlich, hieran die Wirkungsweise der RG-Theorie zu demonstrieren. In allen expliziten Rechnungen dieses Abschnitts beschränken wir uns auf skalare Ordnungsparameter ( $n = 1$ ).

Der erste Schritt der RG-Transformation, vgl. § 3.3, ist durch Gauß-Integrationen leicht zu bewerkstelligen,

$$e^{-\beta H'} = \exp \left[ -\frac{\beta}{2} \sum_{\substack{\vec{q} \\ |\vec{q}| < \Lambda/b}} (r + \kappa q^2) |\phi_{\vec{q}}|^2 \right] \times \prod_{\substack{\vec{q} \\ \Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda}} \left( \frac{2\pi k_B T}{r + \kappa q^2} \right)^{1/2} \quad (3.89)$$

Benutzt wurde, daß

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = (\pi/\alpha)^{1/2} \quad (3.90)$$

$H'$  hat also die Gestalt

$$H' = C + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{q} \\ |\vec{q}| < \Lambda/b}} (r + \kappa q^2) |\phi_{\vec{q}}|^2 \quad (3.91)$$

Die additive Konstante

$$C = -\frac{k_B T}{2} \sum_{\substack{\vec{q} \\ \Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda}} \ln \left( \frac{2\pi k_B T}{r + \kappa q^2} \right) \quad (3.92)$$

spielt die entscheidende Rolle bei der Berechnung der freien Energie, vgl. § 3.2. In der Diskussion der Korrelationsfunktion, auf die wir uns beschränken, kann sie unberücksichtigt bleiben.

Der zweite und dritte Schritt der RG-Transformation besteht in der Ersetzung  $\vec{q}' = b\vec{q}$  und  $\phi_{\vec{q}} = \zeta_b \phi'_{b\vec{q}}$ , folglich

$$H' = C + \frac{1}{2} \zeta_b^2 \sum_{\substack{\vec{q}' \\ |\vec{q}'| < \Lambda}} \left( r + \kappa \left( \frac{q'}{b} \right)^2 \right) |\phi'_{\vec{q}'}|^2 \quad (3.93)$$

Damit der erste Term unter der Summe in den gestrichenen Größen dieselbe Form hat wie in (3.88), muß gelten

$$r' = \zeta_b^2 r \quad (3.94)$$

$$\kappa' = \zeta_b^2 \kappa / b^2 \quad (3.95)$$

Außerdem hat sich die Systemgröße geändert; am Schluß der Rechnung gehen wir aber über zu  $L \rightarrow \infty$ .

Nun setzen wir  $\zeta_b = b$ , so daß  $\kappa' = \kappa$ . Diese Wahl von  $\zeta_b$  impliziert nach (3.82)  $\eta = 0$ . Somit gilt

$$r' = b^2 r \quad (3.96)$$

Diese Gleichung hat, von  $r = \infty$  abgesehen, nur den trivialen, abstoßenden Fixpunkt  $r^* = 0$ . Die gesamte Transformation (3.94) und (3.95) ist bereits linear und besitzt den Eigenwert  $\lambda_1 = b^2$  oder  $y_1 = 2$ . Somit erhalten wir unmittelbar die kritischen Exponenten  $\eta = 0$  und  $\nu = 1/y = 1/2$ , die mit den klassischen Exponenten übereinstimmen.

Nach (3.79) erfüllt die Korrelationsfunktion die Relation

$$G(q, r) = b^2 G(bq, b^2 r) \quad (3.97)$$

Wegen  $r \propto T - T_c$  und  $\nu = 1/2$  ist natürlich  $\xi \sim r^{-1/2}$ . Ersetzen wir in (3.97) die temperaturabhängige Variable  $r$  durch  $\xi$  und wählen anschließend  $b = \xi$ , so folgt das Skalenverhalten

$$G(q, \xi) = \xi^2 g(q\xi) \quad (3.98)$$

in Übereinstimmung mit (3.86) und  $\eta = 0$ . Am Grenzfall  $q \rightarrow 0$  erkennt man außerdem, daß  $\gamma = 1$ , was mit der Skalenrelation (3.6) übereinstimmt. Alle diese Ergebnisse sind aus § 2.5 bereits bekannt, dort fanden wir explizit

$$G(q, \xi) = \xi^2 \frac{k_B T / \kappa}{1 + (q\xi)^2}, \quad (3.99)$$

### $\epsilon$ -Entwicklung

Wie oben ausgeführt, besitzt das Gaußsche Modell einen Fixpunkt  $r^* = 0$ . Der Fixpunkt-Hamiltonian

$$H^* = \frac{\kappa}{2} \sum_{\vec{q}} q^2 |\phi_{\vec{q}}|^2 = \frac{\kappa}{2} \int d^d x (\vec{\nabla} \phi)^2 \quad (3.100)$$

$$|\vec{q}| < \Lambda$$

geht unter der RG-Transformation über in:  $H^* \rightarrow \mathcal{R}_b(H^*) = C^* + H^*$ ; die Konstante  $C^*$  ist durch (3.92) gegeben, wenn wir dort  $r = 0$  setzen.

Wir stellen uns nun die Aufgabe, im Rahmen des  $O(n)$ -Modells die RG-Transformation für einen GL-Hamiltonian durchzuführen, der sich nur wenig von  $H^*$  unterscheidet. Daher schreiben wir

$$H = H^* + \Delta H \quad (3.101)$$

$$\Delta H = \int d^d x \left( \frac{r}{2} \phi^2 + u \phi^4 \right) \quad (3.102)$$

und fassen  $\Delta H$  mit hinreichend kleinen Parametern  $r$  und  $u > 0$  als Störung zum ungestörten Problem  $H^*$  auf. (Den ersten Term  $\propto r$  könnte man ebensogut in das ungestörte Problem aufnehmen.) Mit Hilfe einer Störungstheorie 2. Ordnung bzgl.  $\Delta H$  läßt sich folgendes zeigen:

- i) Für  $d > 4$  wird der Term  $\propto u \phi^4$  zu Null renormiert, d.h.  $u$  ist irrelevant. Bestehen bleibt der *Gaußsche Fixpunkt*  $r_G^* = 0$ ,  $u_G^* = 0$ , verbunden mit klassischen kritischen Exponenten.
- ii) Für  $d < 4$  wird der Gaußsche Fixpunkt in allen Richtungen instabil. Es tritt ein neuer Fixpunkt  $(r^*, u^*)$  auf. Falls  $\epsilon = 4-d \ll 1$ , liegt dieser Fixpunkt in der Nähe des Gaußschen Fixpunkts, genauer:  $r^* = \mathcal{O}(\epsilon)$ ,  $u^* = \mathcal{O}(\epsilon)$ . Zur Berechnung der in  $\epsilon$  linearen Terme in  $r^*$ ,  $u^*$  und den zugehörigen kritischen Exponenten genügt gerade die 2. Ordnung in der Störungstheorie bzgl.  $\Delta H$ . (Die Brauchbarkeit der Störungsrechnung setzt  $\epsilon \ll 1$  voraus. Höhere Ordnungen der Störungstheorie ergeben Korrekturen höherer Ordnung in  $\epsilon$ .)

Zur Durchführung des gestellten Problems müssen anfangs jeweils die “kleinen” und die auszuintegrierenden “großen” Impulskomponenten in  $\Delta H$  separiert werden. Dazu zerlegen wir die Summe (3.58) gemäß

$$\phi(\vec{x}) = \phi^<(\vec{x}) + \phi^>(\vec{x}) \quad (3.103)$$

$$\phi^<(\vec{x}) = L^{-d/2} \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{x}} \quad (3.104)$$

$$|\vec{q}| < \Lambda/b$$

Dann läßt sich der erste Schritt der RG-Transformation schreiben als

$$\begin{aligned} e^{-\beta H'} &= \int \mathcal{D}\phi^> e^{-\beta(H^* + \Delta H)} \\ &= \left( \int \mathcal{D}\phi^> e^{-\beta H^*} \right) \langle e^{-\beta \Delta H} \rangle_> \end{aligned} \quad (3.105)$$

Das Symbol  $\int \mathcal{D}\phi^> \dots$  bezeichnet eine funktionale Integration über die in  $\phi^>(\vec{x})$  enthaltenen Amplituden  $\phi_{\vec{q}}$ . Im letzten Ausdruck haben wir mit  $\int \mathcal{D}\phi^> \exp(-\beta H^*)$  erweitert und den mit Gewichten  $\propto \exp(-\beta H^*)$  berechneten Mittelwert über die Amplituden zu “großen” Impulskomponenten eingeführt,

$$\langle \dots \rangle_{>} = \frac{\int \mathcal{D}\phi^> e^{-\beta H^*}(\dots)}{\int \mathcal{D}\phi^> e^{-\beta H^*}} \quad (3.106)$$

Natürlich hängt dieser Mittelwert noch von  $\phi^<(\vec{x})$  ab. Die weitere Auswertung von (3.105) geschieht mit einer Kumulanten-Entwicklung, die wir bis zur 2. Ordnung ausführen,

$$\langle e^{-\beta \Delta H} \rangle_{>} = \exp \left\{ -\beta \langle \Delta H \rangle_{>} + \frac{\beta^2}{2} (\langle (\Delta H)^2 \rangle_{>} - \langle \Delta H \rangle_{>}^2) + O((\Delta H)^3) \right\} \quad (3.107)$$

Es folgt

$$H' = C^* + \frac{\kappa}{2} \sum_{\substack{\vec{q} \\ |\vec{q}| < \Lambda/b}} q^2 |\phi_{\vec{q}}|^2 + \Delta H' \quad (3.108)$$

mit

$$\Delta H' = \underbrace{\langle \Delta H \rangle_{>}}_{1. \text{ Ordnung}} - \underbrace{\frac{\beta}{2} [\langle (\Delta H)^2 \rangle_{>} - \langle \Delta H \rangle_{>}^2]}_{2. \text{ Ordnung}} + \dots \quad (3.109)$$

Abgesehen von der Reskalierung der Impulse und der Amplituden  $\phi_{\vec{q}}$  stellt der 2. Term in (3.108) wieder den Fixpunkt-Hamiltonian  $H^*$  dar, während  $\Delta H'$  die störungstheoretischen Korrekturen 1. und 2. Ordnung wiedergibt.

Zunächst diskutieren wir die 1. Ordnung,

$$\langle \Delta H \rangle_{>} = \int d^d x \left( \frac{r}{2} \langle (\phi(\vec{x}))^2 \rangle_{>} + u \langle (\phi(\vec{x}))^4 \rangle_{>} \right) \quad (3.110)$$

Im ersten Term wird die Zerlegung

$$(\phi(\vec{x}))^2 = (\phi^<(\vec{x}))^2 + 2\phi^>(\vec{x})\phi^<(\vec{x}) + (\phi^>(\vec{x}))^2 \quad (3.111)$$

eingesetzt. Offenbar gilt  $\langle \phi^>(x) \rangle_{>} = 0$ , so daß der Mittelwert des gemischten Terms verschwindet. Die Mittelwertbildung bei dem quadratischen Term ist einfach auszurechnen,

$$\begin{aligned} \langle (\phi^>(\vec{x}))^2 \rangle_{>} &= L^{-d} \sum_{\substack{\vec{q} \\ \frac{\Lambda}{b} < |\vec{q}| < \Lambda}} \langle |\phi_{\vec{q}}|^2 \rangle_{>} = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (\beta \kappa q^2)^{-1} \\ &= K_d \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} dq q^{d-1} (\beta \kappa q^2)^{-1} \end{aligned} \quad (3.112)$$

Das  $d$ -dimensionale Volumenelement wurde dabei in folgender Weise verarbeitet,

$$\int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \dots = K_d \int dq q^{d-1} \dots \quad (3.113)$$

Der Faktor

$$K_d = \left( 2^{d-1} \pi^{d/2} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \right)^{-1} \quad (3.114)$$

stellt die Oberfläche einer Einheitskugel in  $d$  Dimensionen dividiert durch  $(2\pi)^d$  dar;  $\Gamma(x)$  ist die Gamma-Funktion. Somit ergibt (3.112)

$$\langle (\phi^>(\vec{x}))^2 \rangle = B_d (1 - b^{2-d}) \quad (3.115)$$

mit

$$B_d = \frac{K_d \Lambda^{d-2}}{\beta \kappa (d-2)} \quad (3.116)$$

In Verbindung mit dem ersten Term in  $\langle \Delta H \rangle$ , siehe (3.110), wird die Konstante  $\langle (\phi^>)^2 \rangle$  zwar nicht benötigt, da sie wiederum nur zur freien Energie beiträgt; sie tritt aber erneut auf im gemischten Term des Ausdrucks

$$\langle (\phi^< + \phi^>)^4 \rangle = (\phi^<)^4 + 6(\phi^<)^2 \langle (\phi^>)^2 \rangle + \langle (\phi^>)^4 \rangle \quad (3.117)$$

Der letzte Term  $\langle (\phi^>)^4 \rangle = 3(\langle (\phi^>)^2 \rangle)^2$  ist konstant und braucht wiederum nicht betrachtet zu werden. Somit erhalten wir

$$\langle \Delta H \rangle = const. + \int d^d x \left[ \left( \frac{r}{2} + 6u \langle (\phi^>)^2 \rangle \right) (\phi^<)^2 + u (\phi^<)^4 \right] \quad (3.118)$$

Bei den nachfolgenden Reskalierungsschritten ist zu beachten, daß (die Bedeutung des Symbols  $\sum^<$  ist evident)

$$\int d^d x (\phi^<)^2 = L^d L^{-d} \sum_{\vec{q}}^< |\phi_{\vec{q}}|^2 = \zeta_b^2 \sum_{\vec{q}'} |\phi'_{\vec{q}'}|^2 \quad (3.119)$$

$$\begin{aligned} \int d^d x (\phi^<)^4 &= L^d L^{-2d} \sum_{\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4}^< \phi_{\vec{q}_1} \dots \phi_{\vec{q}_4} \delta_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4, 0} \\ &= b^{-d} \zeta_b^4 (L')^{-d} \sum_{\vec{q}'_1, \dots, \vec{q}'_4} \phi'_{\vec{q}'_1} \dots \phi'_{\vec{q}'_4} \delta_{\vec{q}'_1 + \vec{q}'_2 + \vec{q}'_3 + \vec{q}'_4, 0} \end{aligned} \quad (3.120)$$

An (3.120) kann bereits abgelesen werden, daß  $u' = b^{-d} \zeta_b^4 u$ . Wiederum verlangt  $\kappa' = \kappa$ , daß  $\zeta_b = b$ . Damit haben wir die Transformationsformeln

$$\begin{aligned} r' &= b^2 (r + 12u \langle (\phi^>)^2 \rangle) \\ u' &= b^{4-d} u \end{aligned} \quad (3.121)$$

Wie zu erwarten ist in 1. Ordnung die Transformation bereits linear. Die zugehörige Matrix ist explizit gegeben durch

$$R_b = \begin{pmatrix} b^2 & 12B_d(b^2 - b^{4-d}) \\ 0 & b^{4-d} \end{pmatrix} \quad (3.122)$$

und erfüllt  $R_b R_{b'} = R_{bb'}$ , wie sich sofort nachrechnen läßt. Sie besitzt die Eigenwerte und Eigenvektoren

$$\lambda_1 = b^{y_1}; \quad y_1 = 2; \quad \mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.123)$$

$$\lambda_2 = b^{y_2}; \quad y_2 = 4 - d; \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} -12B_d \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.124)$$

Als einzigen Fixpunkt bekommt man den Gaußschen Fixpunkt  $r_G^* = u_G^* = 0$ .

Offensichtlich sind die beiden Fälle  $d > 4$  und  $d < 4$  wesentlich verschieden. Für  $d > 4$  ist  $\lambda_2 < 1$ ; der Einzugsbereich des Fixpunkts ist in dessen Nähe durch die Richtung des Vektors  $\mathbf{e}_2$  bestimmt. Der Parameter  $u$  erweist sich als irrelevant. Systeme mit  $d > 4$  besitzen demnach klassische kritische Exponenten. Hingegen ist für  $d < 4$  der Gaußsche Fixpunkt ein isolierter Fixpunkt ohne Einzugsbereich, da beide Eigenwerte  $\lambda_\alpha > 1$ . Mithin verliert er seine physikalische Bedeutung (wenn nicht zufällig bereits anfangs  $u = 0$ ), und die Störungsrechnung wird in 2. Ordnung benötigt.

Vorab jedoch bemerken wir, daß man oft zweckmäßigerweise durch Wahl von  $b$  hinreichend nahe 1 zu kontinuierlichen Trajektorien in der  $(r, u)$ -Ebene übergeht. Man setzt  $b = e^l$ , so daß fortgesetzte Transformationen  $b, b^2, b^3$  etc. dem Übergang von  $l$  zu  $2l, 3l$ , etc. entsprechen. Man bildet

$$\frac{1}{l} \left[ \begin{pmatrix} r' \\ u' \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{l} (R_b - 1) \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix} \quad (3.125)$$

und geht zum Limes  $l \equiv \Delta l \rightarrow 0$  über. Die Parameter  $r$  und  $u$ , aufgefaßt als Funktionen einer wieder mit  $l$  bezeichneten kontinuierlichen Variablen, genügen somit der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dl} \begin{pmatrix} r(l) \\ u(l) \end{pmatrix} = \lim_{\Delta l \rightarrow 0} \frac{R_{1+\Delta l} - 1}{\Delta l} \begin{pmatrix} r(l) \\ u(l) \end{pmatrix} \quad (3.126)$$

Zur Berechnung der r.S. verwendet man  $(b^x - 1)/l \simeq x$  usw.

Eine ausführliche Berechnung der 2. Ordnung der Störungstheorie bezüglich  $\Delta H$  findet sich in S.K. Ma "Modern Theory of Critical Phenomena" (Benjamin, 1976). Als Hilfsmittel benutzt man die Eigenschaft Gauß-verteilter Zufallsvariablen, daß sich Mittelwerte von Produkten schreiben lassen als Produkte von Paar-Mittelwerten summiert über alle möglichen Paarungen. Wir geben nur das Ergebnis an und zwar gleich für  $n$ -komponentige Ordnungsparameter. Es gilt wieder  $\zeta_b = b$ , d.h.  $\eta = 0$ , sowie

$$\frac{dr}{dl} = 2r + (n+2)ug \left(1 - \frac{r}{\kappa\Lambda^2}\right) + O(u^2) \quad (3.127)$$

$$\frac{du}{dl} = \epsilon u - (n+8)u^2 \frac{g}{\kappa\Lambda^2} \quad (3.128)$$

mit

$$g = \frac{4K_4\Lambda^2}{\beta\kappa} \quad (3.129)$$

Die zugehörigen Trajektorien zeigt Abb. (3.9). Während für  $d > 4$  die Aussagen aus der 1. Ordnung der Störungstheorie bestätigt bleiben, ändert sich das Bild für  $d < 4$ . Einfach diskutieren läßt sich sofort die Differentialgleichung für  $u(l)$ , die unabhängig von  $r(l)$  ist. Sie beschreibt eine "Bewegung" längs der  $u$ -Achse in einem "Potential", welches für  $d < 4$  ein Minimum außerhalb des Nullpunkts besitzt. Dieses Potentialminimum bestimmt die in  $\epsilon$  lineare Koordinate eines neuen Fixpunkts, der zusätzlich zu dem isolierten Gaußschen Fixpunkt auftritt. Man erhält

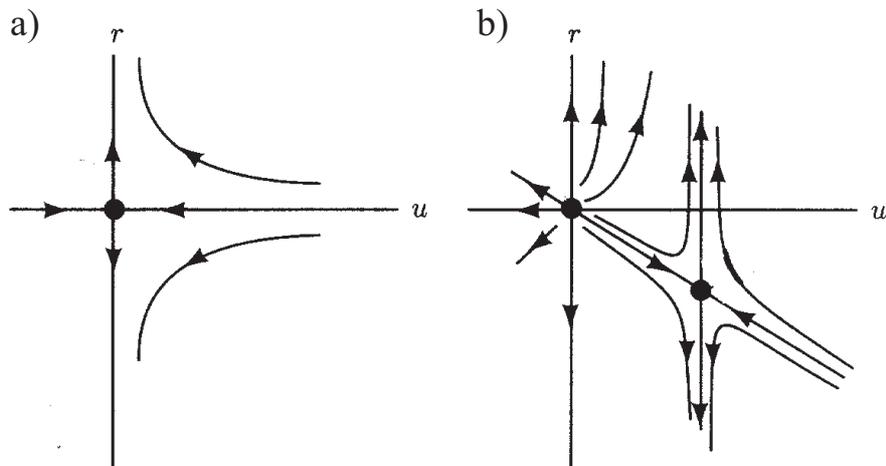
$$u^* = \epsilon \frac{\kappa\Lambda^2}{g(n+8)}; \quad r^* = -\epsilon \left(\frac{n+2}{n+8}\right) \frac{\kappa\Lambda^2}{2} \quad (3.130)$$

Offenbar werden die Terme  $\propto u^2$  in (3.127) bei der Berechnung des Fixpunkts in erster Ordnung bezüglich  $\epsilon$  nicht benötigt.

Die um diesen Fixpunkt linearisierte Transformation

$$\frac{d}{dl} \begin{pmatrix} \delta r(l) \\ \delta u(l) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \epsilon \frac{n+2}{n+8} & (n+2)g \\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta u \end{pmatrix} \quad (3.131)$$

besitzt Eigenwerte  $\lim_{\Delta l \rightarrow 0} (e^{\Delta l y_\alpha} - 1)/\Delta l = y_\alpha$  und Eigenvektoren  $\mathbf{e}_\alpha$  gemäß



**Abbildung 3.9:** Flußdiagramm in 2. Ordnung Störungsrechnung für a)  $d > 4$  und b)  $d < 4$ .

$$y_1 = 2 - \epsilon \frac{n+2}{n+8} = \frac{1}{\nu}; \quad \mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.132)$$

$$y_2 = -\epsilon; \quad \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} \frac{(n+2)g}{y_1 \epsilon} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.133)$$

Auf diese Weise entstehen aus der zweiten Ordnung Störungstheorie Korrekturen zum kritischen Exponenten  $\nu = 1/y_1$  von 1. Ordnung in  $\epsilon$ ,

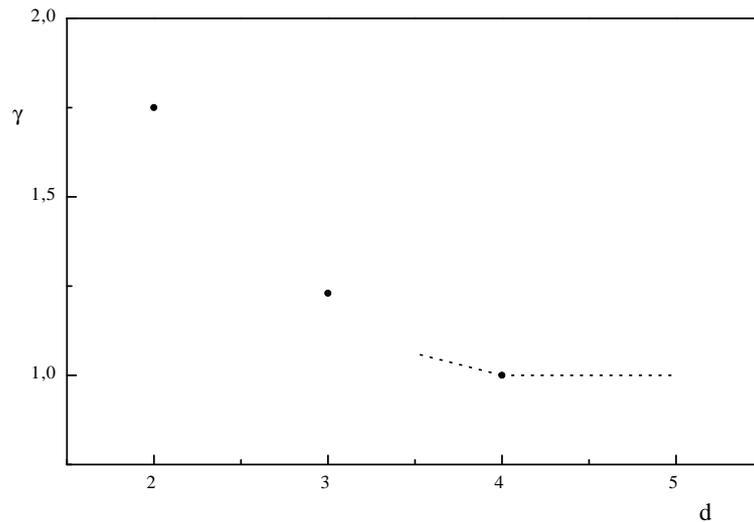
$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{2} \frac{n+2}{n+8} \quad (3.134)$$

Mit der Skalenrelation  $\gamma = \nu(2 - \eta)$  erhalten wir wegen  $\eta = 0$

$$\gamma = 1 + \epsilon \frac{n+2}{2(n+8)} \quad (3.135)$$

Diese Korrekturen 1. Ordnung in  $\epsilon$  sind zwar nicht geeignet, auf  $d = 3$  zu extrapolieren; sie gehen vom Vorzeichen her jedoch in die richtige Richtung und zeigen auch, daß die Korrekturen zu den klassischen Exponenten mit  $n$  anwachsen.

Zur Illustration zeigen wir in Abb. (3.10) für den Ising-Fall ( $n = 1$ ) den Exponenten  $\gamma$  in Abhängigkeit von der Dimension. Der Wert für  $d = 3$  entstammt Computersimulationen. Gestrichelt eingezeichnet ist die Extrapolation von (3.135). Höhere Ordnungen der  $\epsilon$ -Entwicklung für die kritischen Exponenten wurden von K.G. Wilson und E. Brezin mit feldtheoretischen Methoden berechnet. Insbesondere ist der führende Term in  $\eta$  von 2. Ordnung,  $\eta = \epsilon^2(n+2)/2(n+8)^2 + O(\epsilon^3)$ .



**Abbildung 3.10:** Kritischer Exponent  $\gamma$  des Ising-Modells ( $n = 1$ ) in Abhängigkeit von der Dimension  $d$  ( $d = 4 : \gamma = 1$ ,  $d = 3 : \gamma \simeq 1.24$ ,  $d = 2 : \gamma = 7/4$ ). Gestrichelt: Extrapolation nach der  $\epsilon$ -Entwicklung in 1. Ordnung.

Eine wichtige Bemerkung an dieser Stelle betrifft den Einfluß weiterer Terme im GL-Hamiltonian. Bei  $O(n)$ -Symmetrie wird im allgemeinen der Term

$$u_6 \int d^d x (\phi(\vec{x}))^6 \quad (3.136)$$

zu (3.102) hinzutreten. Daraus entspringt eine 3-parametrische RG-Transformation für  $r, u$  und  $u_6$ . Die Gleichung für  $u_6$  in 1. Ordnung Störungstheorie ergibt sich auf ähnliche Weise wie in (3.120). Das Integral erzeugt einen Faktor  $L^d(L^{-d})^3 \zeta_b^6 = b^{-2d} \zeta_b^6 (L')^{-2d}$ , so daß  $u'_6 = b^{-2d} \zeta_b^6 u_6$ . In der Nähe des Gaußschen Fixpunktes galt  $\zeta_b = b$ , so daß  $u'_6 = b^{6-2d} u_6$ . Offenbar wird  $u_6$  zu Null renormiert, sofern  $d > 3$ . Die durch  $u_6$  beschriebene Kopplung ist in dieser Näherung *irrelevant* für  $d > 3$ .

Mit ähnlichen Methoden lassen sich auch anisotrope Systeme behandeln. Ist der Ordnungsparameter ein 3-komponentiger Vektor und liegt kubische Anisotropie vor, vgl. (1.29), so erhält man eine weit kompliziertere Fixpunktstruktur. Neben dem trivialen Gaußschen Fixpunkt besitzt das System einen Ising-Fixpunkt  $I$  mit  $u^* = 0$ . Die zugehörigen Exponenten sind gegeben durch (3.134) und (3.135) für  $n = 1$ . In allen anderen Fällen ist entweder ein Heisenberg-Fixpunkt  $H$  ((3.134) und (3.135) mit  $n = 3$ ) oder ein zusätzlicher kubischer Fixpunkt  $C$  zuständig. Abhängig von der anfänglichen Größe der Anisotropie erwartet man also kritische Exponenten, die entweder zu  $H$  oder zu  $C$  gehören. Möglich sind auch Crossover-Phänomene, die dann auftreten, wenn im Flußdiagramm die Trajektorie  $C$  oder  $H$  passiert um dann in den jeweils anderen Fixpunkt einzumünden. (Genauer findet sich bei A. Aharony, in "Phase Transitions and Critical Phenomena **6**" hrsg. v. C. Domb, M.S. Green (Academic Press London, 1976) Seite 357.)