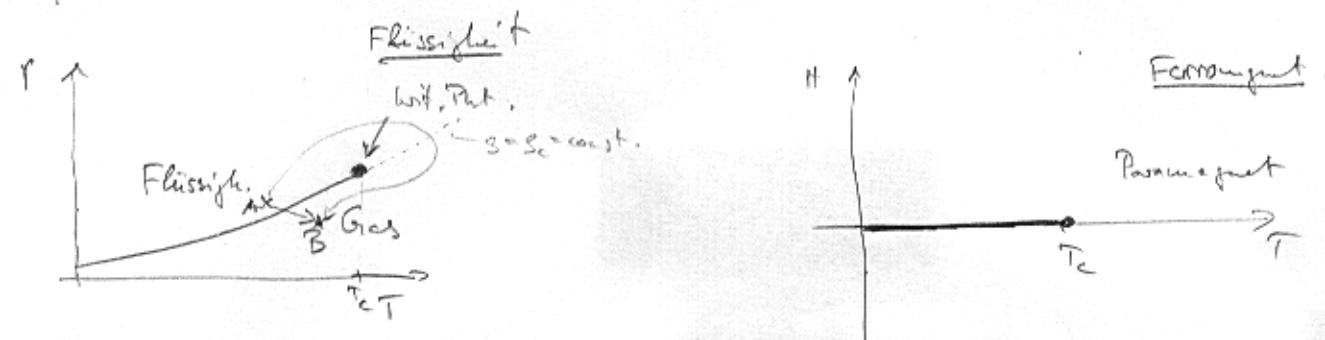


# Phasenübergänge in geordneten Systemen

Phasenübergänge sind wohlbekannt aus dem fügl. Leben. Beispiele sind Übergänge von einer Flüssigkeit zum Gas oder Magneten.

Oft wird ein Phasediagramm angegeben, wie etwa



hier fundamentaler Unterschied zw.

Flüssigkeit und Gas (man kann auch ohne Phasenübergang von A nach B kommen). Anders als beim Übergang flüssig - fest (nur Symmetrie).

Was kann man also die beiden Phasen voneinander unterscheiden? Man kann verschiedene, Ordnungsparameter zu finden, der ist für  $T > T_c$  und  $\neq 0$  für  $T < T_c$ . Bei der Flüssigkeit:  $\Theta = \frac{3-s}{N} \frac{V_f}{V_i}$ , gemessen direkt links bzw. rechts über der krit. Linie. Offensichtlich ist  $\Delta\Theta = 0$  für  $T > T_c$  (weil es kein krit. Pkt. gibt) und  $\neq 0$  für  $T < T_c$ .

Ferromagnet:  $m = \frac{1}{N} \sum_i \langle s_i \rangle$  ist Ordnungsparameter,  
Magnetisierung pro Spin

Was passiert bei Annäherung an den krit. Punkt ( $\frac{(T-T_c)}{T} \ll 1$ )?

Beobachtungen:

Flüssigkeit

$$\Theta = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \sim |T-T_c|^\beta & T < T_c \end{cases}$$

$$\text{Kompressibilität } \chi_T = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_T \sim |T-T_c|^{-\gamma}$$

$$\text{Sp. Wärme } C_V = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V \sim |T-T_c|^{\alpha}$$

$$\text{krit. Isotherme } l_p \cdot p_c \sim |V-V_c|^\delta$$

$$\text{Korrelationslänge } \langle s(r) s(r') \rangle - s^2 \sim e^{-r/\xi} \quad \xi \sim |T-T_c|^{-\nu}$$

$$m = \begin{cases} 0 & T > T_c, (4-\alpha) \\ \sim |T-T_c|^\beta & T < T_c \end{cases}$$

$$\text{Suszeptibilität } = \frac{\partial m}{\partial h} \sim |T-T_c|^{-\gamma}$$

$$C_V = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V \sim |T-T_c|^\alpha$$

$$H \sim m^\delta$$

$$\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \sim e^{-d(i,j)/\xi} \quad \xi \sim |T-T_c|^{-\nu} \quad \textcircled{1}$$

Alle Observable verhalten sich wie Potenzgesetze mit jeweils ihren eigenen Exponenten.

Frage:

1. Wann Potenzgesetze?
2. Was sind die Exponenten?

Die erste Frage kann hier nicht beantwortet werden (Renormierungsgruppentheorie). Die zweite kann ~~die~~ in einer speziellen Näherung beantwortet werden.

### Mean-field Näherung für Feromagnete

$$\text{Hamiltonfkt. } \mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + H \sum_i s_i \quad s_i = \pm 1, J > 0$$

$$\begin{aligned} &= - \sum_i s_i \left( J \sum_{j \in \text{Nachb.}} s_j + H \right) \\ &= - \sum_i s_i \left[ J z \langle s \rangle + H + J \underbrace{\left( \sum_{j \in \text{NB}} s_j - z \langle s \rangle \right)}_{\text{vernachlässigt}} \right] \end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_{MF} = - \sum_i s_i (J z \langle s \rangle + H)$$

Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z_{MF} &= \text{Tr}_{\{s_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{MF}} = \text{Tr}_{\{s_i\}} e^{\beta \sum_i s_i (J z \langle s \rangle + H)} \\ &= \prod_i \sum_{s_i=\pm 1} e^{\beta s_i (J z \langle s \rangle + H)} = \prod_i \left( e^{\beta (J z \langle s \rangle + H)} + e^{-\beta (J z \langle s \rangle + H)} \right) \\ &= 2^N \cosh^N (\beta (J z \langle s \rangle + H)) \end{aligned}$$

Freie Energie

$$F_{MF} = -k_B T \log Z_{MF} = -k_B T N \left( \log (2 \cosh \beta (J z \langle s \rangle + H)) \right)$$

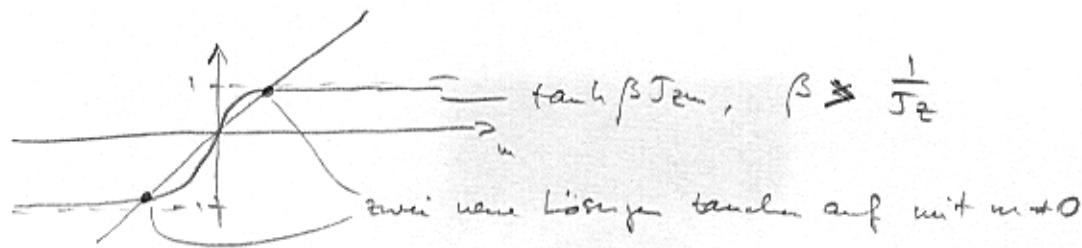
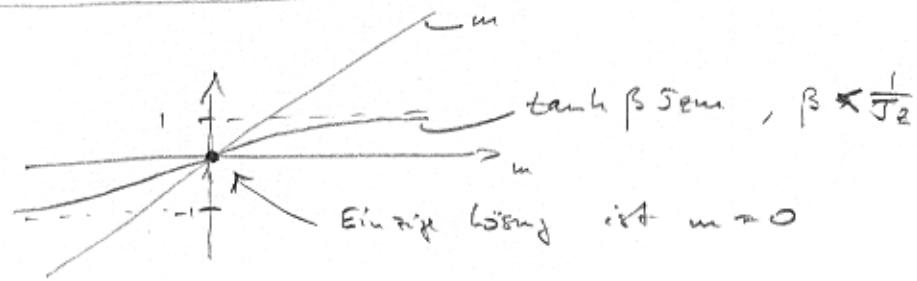
Magnetisierung

$$m = \langle s \rangle = \frac{1}{N} k_B T \frac{\partial \log Z_{MF}}{\partial H} = -\frac{1}{N} \frac{\partial F_{MF}}{\partial H} = \frac{k_B T}{2} \tanh(\beta (J z \langle s \rangle + H)) \propto$$

Selbstkonsistenzgleich!

$$\Leftrightarrow \boxed{m = \tanh \beta (J z m + H)}$$

# Lösung der Selbstkonsistenzl. bei $H=0$



Approximative Lösung für  $\beta \approx \frac{1}{J_2} =: \beta_c$

Taylorentwicklung von  $\tanh x$ :

$$\tanh x = x - \frac{1}{3}x^3 + \mathcal{O}(x^5)$$

$$\hookrightarrow m = \beta J_{2m} - \frac{1}{3}\beta^3 J_2^3 m^3 \quad \text{setze } \boxed{k_B = 1}$$

$$\Leftrightarrow m^2 = 3 \frac{\beta J_2 - 1}{\beta^3 J_2^3} = \frac{3}{\beta^2 J_2^3} \cdot \left( J_2 - \frac{1}{\beta} \right) = \frac{3 T^2}{J_2^3} \left( \underbrace{J_2 - T}_{T_c} \right) = \frac{3 T^2}{J_2^3} (T_c - T)$$

$$\Rightarrow m \sim |T - T_c|^{1/2} \quad \Rightarrow \boxed{\beta \approx \frac{1}{2}}$$

## Suszeptibilität

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{\partial}{\partial H} \tanh(\beta(J_{2m} + H)) \\ &= \tanh'(\beta(J_{2m} + H)) \left( \beta J_2 + \frac{\partial m}{\partial H} + \beta \right) \\ &= \left( 1 - \underbrace{\tanh^2(\beta(J_{2m} + H))}_{=m^2} \right) (\beta J_2 \chi + \beta) \end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \chi (1 - (1-m^2) \beta \frac{T_c}{J_2}) = \beta (1-m^2)$$

$$\Leftrightarrow \chi = \frac{1-m^2}{T_c - T_c(1-m^2)} \sim \frac{1}{|T - T_c|} \quad \Rightarrow \boxed{\gamma = 1}$$

Analog:  $\boxed{\alpha = 0}$  (Unstetigkeit, aber keine Divergenz der spez. Wärme)

## Krit. Isotherme

$$\beta = \beta_c = \frac{1}{T_c} \Rightarrow \frac{1}{J_2} : m = \tanh \left( m + \frac{H}{J_2} \right) = m + \frac{H}{J_2} - \frac{1}{3} \left( m + \frac{H}{J_2} \right)^3 + \mathcal{O} \left( \left( m + \frac{H}{J_2} \right)^5 \right)$$

$$\Rightarrow \left( \frac{2H}{J_2} \right)^{1/2} = 2m + \frac{H}{J_2} \Rightarrow \boxed{H = \frac{J_2}{2} m^2}$$

(3)

$$\Rightarrow \frac{H}{J_2} = \frac{1}{3} \left( m + \frac{H}{J_2} \right)^3 = \cancel{\frac{1}{3}} \cancel{m^3} + \cancel{m^2} \frac{H}{J_2} + m \cancel{\frac{H^3}{(J_2)^2}} + \cancel{\frac{1}{3}} \cancel{\frac{H^3}{(J_2)^2}}$$

$$\Leftrightarrow \left( \frac{3H}{T_c} \right)^{1/3} = m + \frac{H}{T_c} \quad \frac{H}{T_c} \ll 1 \Rightarrow \frac{H}{T_c} \ll \left( \frac{m}{T_c} \right)^{1/3}$$

$$\hookrightarrow m \sim \left( \frac{H}{T_c} \right)^{1/3} \xrightarrow[\text{bzw. } H \sim m^3]{\delta(\frac{H}{T_c})} \boxed{\delta = 3}$$

### Korrelationslänge

$$\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \sim e^{-\frac{|s_i - s_j|}{\xi}} \\ \xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$$

Reduzierung etwas aufwändige. Ergebnis:  $\boxed{\nu = \frac{1}{2}}$

Man kann eine analoge Rechnung für den Übergang Flüssigkeit-Gas mit Hilfe des Van-der-Waals-Modells durchführen und erhält das erstaunliche Ergebnis, dass alle Exponenten die gleichen sind wie beim Ising-Modell in Mean-field-Näherung!

Offensichtlich ist hier etwas sehr Erstaunliches am Werk. Zwei vollkommen unterschiedliche Systeme zeigen nicht nur qualitative Ähnlichkeit (Potenzgesetze), sondern sogar quantitative (Exponenten). Dies wird als Universalität bezeichnet.

Es gibt nun eine handvoll verschiedener (bekannter) Universalitätsklassen, und jeder normale Phasenübergang gehört zu einer solchen Klasse an.

Ursprung der Universalität sind Symmetrien. In beiden Fällen ist der Ordnungsparameter eine skalare Größe mit <sup>mit ± Symmetrie</sup> und die Überübereinstimmung führt daher, dass eine Taylorentwicklung im Ordnungsparameter generischerweise zu den gleichen Ergebnissen führen muss.

Wie gut ist die Mean-field Näherung? Sie besteht darin, den Term

$\sum_i \sum_{j \in N_B(i)} s_i (s_j - 2\langle s \rangle)$  zu vernachlässigen. Der relative Fehler, den man dabei macht, kann quantifiziert werden durch

(Ginzburg-Krit.)

$$E \approx \frac{\left\langle \sum_i' s_i (\sum_{j \in N_B(i)} s_j - 2\langle s \rangle) \right\rangle}{\sum_i' \langle s_i \rangle \langle s_i \rangle} = \frac{\sum_i' (s_i \langle s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle)}{\sum_i' \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle} \quad \begin{array}{l} f. T < T_c, \\ d.h. \langle s_i \rangle \neq 0 \end{array}$$

Dabei bedeutet  $\sum'$ , dass die Summe nur über  $i \in V_S$  zu nehmen ist, wobei  $V_S$  ein Volumen mit Ausmaßen  $\sim \xi^d$  ist.

Für Spins außerhalb dieses Volumens ~~sind~~ sind die Spinnwellenwerte nicht mehr korreliert, was die Fehlerabschätzung zumindest machen würde.

Der Zähler ist ~~noch~~ gegeben durch die Suszeptibilität  ~~$\chi$~~  und  $T$ , und der Nenner ist der Ordnung parameter  $m \langle s \rangle^2$  ~~der~~ multipliziert mit  $V_S \sim \xi^d$ .

$$E \approx \frac{T \chi}{m^2 \xi^d} \sim \frac{T |T-T_c|^{-\beta}}{|T-T_c|^{2\beta} (T-T_c)^{-d}} = T |T-T_c|^{-d-\beta-2\beta} = T |T-T_c|^{\frac{d}{2}-1-\beta} = T |T-T_c|^{(d-4)/2}$$

Die Mean-field Näherung bleibt gültig, solange  $E \ll 1$ . Für  $d > 4$  ist das automatisch der Fall in der Nähe des krit. Punktes, für  $d < 4$  ist das nicht der Fall. Somit ist  $\boxed{d=4}$  die obere kritische Dimension, oberhalb welcher Mean-field-Theorie die exakten Exponenten liefert. Unterhalb von  $d=4$  müssen andere Methoden benutzt werden (Renormierungsgruppe).

~~zusätzlich~~ Noch eine Bemerkung: Es gibt neben der oberen krit. Dimension auch noch die untere krit. Dimension, unterhalb deren es keinen Phasenübergang ~~ta~~ mehr gibt (bzw. es ist nach  $T=0$  gewandt). Für Ising-Ferromagnet (bzw. allgemein für Hamiltonfkt. mit diskreter Symmetrie) ist sie  $d=1$ .

## Skalenannahme

Der Zoo der Exponenten  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta, \dots$  ist sehr unübersichtlich. Gibt es wissentlich so viele verschiedene Exponenten (i.e. einen für jede Observable), oder hängen sie irgendwie zusammen?

Betrachte  $\alpha, \beta$  und  $\gamma$  für Ising-Modell

	Mean-field	$d=2$	$d=3$
$\alpha$	0	0	0,11
$\beta$	$1/2$	$1/8$	$0,325$
$\gamma$	1	$7/4$	$1,2465$
$\alpha+2\beta+\gamma$	2	2	2

Zufall?

~~Hieraus kann man nicht, dass die freie Energie abhängt~~

Wenn man annimmt, dass die Physik bestimmt wird durch die Korrelationslänge (d.h. das System zeigt immer das gleiche Verhalten, wenn man auf der Längenskala der Korrelationslänge konsistent), dann sollte dies in der Form der freien Energie (oder irgend einer anderen Observable) zum Ausdruck kommen. Nehmen wir daher an, dass die freie Energie pro Volumen die Form hat (mit  $\tau = T - T_c$ )

$$F(\tau, H) = \cancel{E_s(\tau)} + \cancel{\frac{H}{\tau} E_s(\frac{\tau}{\tau^{\Delta}})} - \tau^{-\Delta} E_s(H\tau^{-\Delta}), \quad \tau^{-\Delta} = \begin{cases} \tau^{-\Delta} & \tau > 0 \\ -(H\tau)^{-\Delta} & \tau < 0 \end{cases}$$

$$\frac{f(\tau, H)}{T} = \tau^{2-\alpha} F_s(H\tau^{-\Delta}) \quad \bar{S} = \bar{S}(\tau) \sim \tau^{-\nu} \rightarrow \tau^{2-\alpha} \sim \bar{S} \sim \tau^{-\nu} \Rightarrow 2-\alpha = \nu d$$

Hieraus folgt für  $H=0$ , dass  $\frac{C_V}{V} = T \frac{\partial f}{\partial T} \sim \tau^{-\alpha/2} \Rightarrow \alpha = 2 - \nu d$ .

Man kann also auch schreiben

$$\frac{f(\tau, H)}{T} = \tau^{2-\alpha} \bar{S}(f(\tau^{-\Delta})) \quad \text{bei } H=0$$

$$\Rightarrow M \cancel{H} - \cancel{H} \frac{\partial f}{\partial H} \sim \tau^{2-\alpha} F_s'(H\tau^{-\Delta}) \tau^{-\Delta} \cancel{\sim} \tau^{\beta} \Rightarrow \beta = 2 - \alpha - \Delta$$

$$\chi = \frac{\partial \bar{M}}{\partial H} = \tau^{2-\alpha} F_s''(H\tau^{-\Delta}) \tau^{-2\Delta} \underset{\text{bei } H=0}{\sim} \tau^{-\gamma} \Rightarrow -\gamma = 2 - \alpha - 2\Delta$$

$$\begin{aligned} -\gamma - 2\beta &= -2 + \alpha \\ \Rightarrow \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 \end{aligned}$$

⑥

## Zusammenfassung

Kontinuierliche Phasenübergänge zeigen folgende Phänomene

- Potenzgesetze
- universelle Exponenten
- Mean-field Exponenten gültig oberhalb von  $d_0$  ( $=4$  für Ising-Ferromagnet)
- kein Phasenübergang mehr für  $d < d_u$  ( $=1$  für Ising-Ferromagnet)
- Skalenhypothese (geweitert durch RG) liefern Beziehungen zwischen den Exponenten  $\rightarrow$  nur zwei unabh. Exponenten

# Perkolation

~~Gesamt~~

## Einführung

Gitter ( $d$ -dim)



Gitterplätze sind besetzt mit W-keit  $p$ , unbesetzt mit W-keit  $1-p$  ( $0 \leq p \leq 1$ ).

Das ist alles! In diesem Modell ~~ist~~ sind keine thermischen Freiheitsgrade vorhanden, sondern nur eingeschränkte Bewegung. Langweilig? Es kommt nur darauf an, genau genug hin zu schauen.

Perkolation ist Modell für Wildbrände, Schwämme, Polymere, ...  
Zwei Grenzfälle: 1.  $p \ll 1$ : es werden nur wenige Plätze besetzt sein. Die Wahrscheinlichkeit, dass zwei benachbarte Plätze besetzt sind, ist  $\sim p^2 \ll p \ll 1$ , also vernachlässigbar klein.

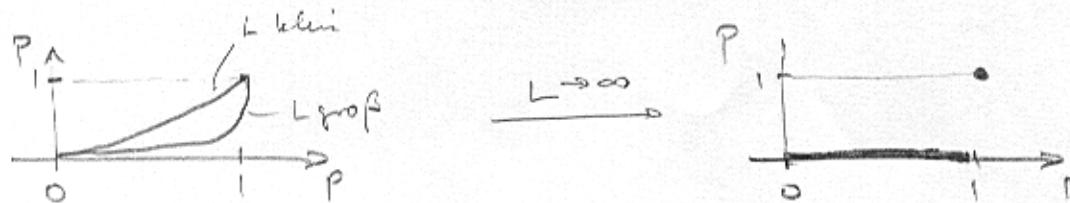
2.  $p \approx 1$ : Es sind fast alle Plätze besetzt. Für die Löcher trifft jetzt das ~~oben gesetzte~~ <sup>für die leeren Plätze</sup> zu. In diesen Fall kann man sich leicht auf einen Weg, der nur über besetzte Plätze führt, von einem Rand des Gitters zum anderen kommen, was im 1. Fall sicher unmöglich war.

Zwischen diesen beiden Grenzfällen muss irgendwo ein Übergang sei vom Zustand ohne durchgehenden Weg zum Zust. mit durchg. Weg.

## 1-dim Perkolation



offensichtlich ist ein durchgehender Cluster von links und rechts genau dann vorhanden, wenn alle Plätze besetzt sind. Die W-keit definiert ist  $P = p^L$  ( $L$ : Anzahl Gitterplätze).



Es gibt also einen durchgehenden Cluster für  $p=1$  und keine  
 Phasenübergang bei  $p=p_c=1$ .  
 sonst. (Dies entspricht der Situation beim 1-d Ferrimagneten,  
 wo der Phasenübergang zu  $T=0$  verschoben ist.)

■

Wie verhalten sich die Clustergrößen? W-keit, dass  $\exists$  Gitterplatz i  
 am linken Rand eines Clusters der Größe  $s$  ist, ist

$$P(s) = (1-p) p^s (1-p), \text{ in einem Cluster der Größe } s \text{ kann}$$

einer

Es gibt  $L$  Gitterplätze, die alle Endpunkt eines Clusters

sein können, daher gibt es  $L p^s (1-p)^2$  Cluster der Größe  $s$ .

Sei  $u_s = p^s (1-p)^2$  die Anzahl der  $s$ -Cluster pro Gitterplatz.

Die W-keit, dass  $\exists$  Gitterplatz an beliebiger Stelle in einem Cluster  
 der Größe  $s$  ist, ist  $s u_s$  (denn es gibt  $s$  Möglichkeiten).

Die W-keit, dass ein ~~besteck~~ Gitterplatz zu einem Cluster beliebiger  
 Größe  $\geq 1$  gehört, muss gleich  $p$  sein (denn es ist besetzt mit  
 W-keit  $p$  und gehört dann auch zu genau einem Cluster). Dafür

$$\sum_{s=1}^{\infty} s u_s = p \text{ sein.}$$

Wie groß ist die mittlere Clustergröße  $\bar{s}$ , zu der ein zufällig ausgewählter  
 bester Gitterplatz gehört? W-keit,

$$\bar{s} = \sum_s w_s s \quad \text{tao } \underbrace{\text{besetzt}}_{\text{unter der Bed. dass es besetzt ist}} \quad \text{w-keit, dass Gitterplatz zu Cluster der Größe } s \text{ gehört.}$$

$$w_s = \frac{s u_s}{\sum_s s u_s}$$

$$\hookrightarrow \bar{s} = \frac{\sum_s s^2 u_s}{\sum_s s u_s} = \dots = \frac{1+p}{1-p} \quad \text{divergiert für } p \rightarrow p_c = 1$$

mit  $\gamma = 1$

## Korrelationsfkt.

Ising-System:  $\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$ . Analoges Ausmaß funktioniert hier nicht, da Gitterplätze meist voneinander ( $\Rightarrow \sim 0$ ).

Statt dessen:

$g(r) = \text{W-keit, dass zwei Plätze im Abstand } r \text{ zum gleichen Cluster gehören}$

$$= p^r$$

$$= e^{-r \log p} \quad \text{Korrelationslänge}$$

$$\Rightarrow \xi = \frac{1}{\log p} = \frac{1}{\log(1-(1-p))} \approx \frac{1}{1-p} \quad \text{für } p \rightarrow 1$$

$$\text{Divergenz mit } \boxed{\nu = 1}$$

Percolation zeigt ~~stetig~~ genau die gleichen Charakteristiken wie ein Phasenübergang in geordneten Systemen, nur dass der Kontrollparameter nicht die Temperatur ist, sondern die W-keit  $p$ .

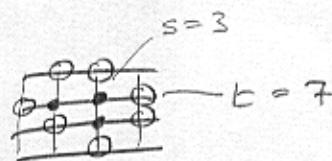
$d \geq 2$

In höheren Dimensionen gibt es keine einfache Formel für  $\xi$ , wie in  $d=1$ . Allgemein kann man schreiben

$$n_s = \sum_t g_{st} p^s (1-p)^t,$$

↑

Anzahl Clusterknotf.  
mit  $s$  Plätzen und  $t$  Umfangsplätzen



aber  $g_{st}$  ist nicht bekannt.

Für  $p > p_c$  tritt jetzt ein unendlich großer Cluster auf.

Der Bruchteil  $P = \frac{\# \text{Plätze im unendl. Cluster}}{\# \text{Plätze}}$  ist also 0 für  $p < p_c$  und steigt für  $p > p_c$  an. Nun gilt

$$P + \sum_s s n_s = p, \text{ denn die Summe zählt nur die endlich großen Clusters.}$$

Vorgeben: Skalierungnahme

$$u_s(p) = s^{-\tau} f((p-p_c)s^\sigma) \quad \text{für } p \rightarrow p_c, s \rightarrow \infty$$

Stimmt die Annahme mit der  $d=1$  Lösung überein? Dafür war

$$\begin{aligned} u_s &= p^s (1-p)^2 = s^{-2} [s(1-p)]^2 e^{s \log p} \\ &= s^{-2} [s(1-p)]^2 e^{s \log(1-(1-p))} \\ &\approx s^{-2} [s(1-p)]^2 e^{-s(1-p)} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow f(x) = x^2 e^{-x}$$

$$\tau = 2$$

$$\sigma \approx 1$$

$$p_c = 1$$



$$\sum_s s u_s(p_c)$$

Mit dieser Skalierung kann man  $P = p - \sum_s s u_s = (p_c) \sum_s s u_s + p - p_c$  ausrechnen

und erhält  $P \sim (p-p_c)^\beta$  mit  $\beta = \frac{\tau-2}{\sigma}$ .

Entsprechend erhält man  $S = \sum_s s^2 u_s \sim (p-p_c)^{-\frac{3-\tau}{\sigma}}$ , d.h.  $\gamma = \frac{3-\tau}{\sigma}$ ,

und  $M := \sum_s u_s \sim (p-p_c)^{\frac{\tau-1}{\sigma}}$ . Setzt man  $\frac{\tau-1}{\sigma} = 2-\alpha$ , so erhält

man wieder

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 - \frac{\tau-1}{\sigma} + 2 \frac{\tau-2}{\sigma} + \frac{3-\tau}{\sigma} = \frac{2\sigma - \tau + 1 + 2\tau - 4 + 3 - \tau}{\sigma} = 2.$$

Perkolation verhält sich also genau so, wie ein thermischer Phasenübergang, nur die Exponenten sind andere. Aber wieder gibt es nur zwei maßgebliche Exponenten, alle anderen werden durch sie bestimmt.