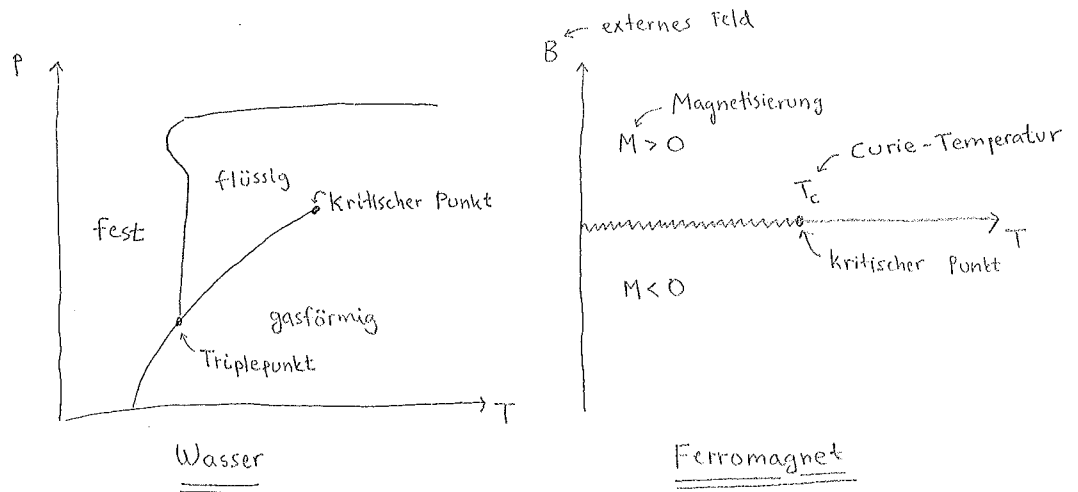


### 3. Phasenübergänge

#### 3.1 Allgemeines [TF 35-36]

Ausgangslage: Im Kapitel 2.3 waren wir schon einem Phasenübergang begegnet, und jetzt sollen sie allgemeiner analysiert werden. Beispiele:



Klassifizierung:

Als Achsen des Phasendiagramms sollen intensive Variablen gewählt werden. Die Variablen bestimmen, welches thermodynamisches Potential zum Problem geeignet ist:

$$(T, p) \Rightarrow G(T, p, N) = N\mu(T, p), \quad dG = -SdT + Vdp + \mu dN$$

[vgl. ST I, Kapitel 3.6]

$$(T, B) \Rightarrow F(T, B), \quad dF = -SdT - VMdB$$

Über die Phasenübergangskurve ist das geeignete Potential immer kontinuierlich. Im Gleichgewicht wird das Potential minimiert; ein Phasenübergang der ersten Ordnung entsteht, wenn es tatsächlich um zwei unterschiedliche Funktionen geht, die entlang der Kurve denselben Wert haben. In diesem Fall weisen die ersten Ableitungen eine Unstetigkeit auf; so ist zum Beispiel  $S = -\frac{\partial G}{\partial T} = -\frac{\partial F}{\partial T}$  unstetig.

Ein Phasenübergang ist von zweiter Ordnung bzw. kontinuierlich, wenn die ersten Ableitungen stetig sind. Die zweiten Ableitungen, z.B.  $C \propto \frac{\partial S}{\partial T} \propto \frac{\partial^2 G}{\partial T^2}$ , sind unstetig und in der Regel auch divergent (vgl. Seite 16). In den obigen Skizzen ist der kritische Punkt von dieser Art.

Wenn man „glatt“ von einer in eine andere Phase übergehen kann, z.B. rechts vom kritischen Punkt in den obigen Skizzen, spricht man von einem „Crossover“.

Magnetische Systeme:

Wir diskutieren zuerst Systeme, die aus Spins mit magnetischem Moment bestehen. Solche Systeme sind einfach zu definieren, und können trotzdem viele Arten von Phasenübergängen erfahren, weshalb sie als gute Prototypen dienen können.

Zur Erinnerung: ein Elektron im magnetischen Feld:

\* magnetisches Moment:  $\vec{\mu} = \mu \vec{S}$ ,  $\mu = \frac{g \hbar}{2 m_e c}$

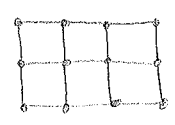
$= -2 \mu_B \vec{S}$ ,  $\mu_B = \frac{e \hbar}{2 m_e c}$  "Bohrsches Magneton"

\* Energie im Magnetfeld:  $\vec{E} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$

$= -\mu_B B S_z$

$= 2 \mu_B S_z B \stackrel{S_z = \pm \frac{1}{2}}{\approx} \pm \mu_B B$

Wir betrachten ein Kristall mit N Gitterpunkten:



$\Rightarrow H = \sum_{i=1}^N 2 \mu_B B S_{z,i}$  (vgl. Aufgabe 1 auf Übungsblatt 2)

↑ Hamilton-Operator

Jetzt wird verallgemeinert:

- \* das Gitter sei kubisch und d-dimensional, z.B. 1d, 2d, 3d, ...
- \* statt  $S_{z,i} = \pm \frac{1}{2}$  benutzen wir die Variablen  $\tau_i = \pm 1$ , wobei es um das Ising-Modell geht. Ein ähnliches Modell hat  $\tau_i = 1, 2, \dots, q$  (Potts-Modell).
- \* das Magnetfeld wird in einer skalierten Form dargestellt, in obigen Beispiel  $h := -\mu_B B$ , so dass  $H = -h \sum_i \tau_i$ .
- \* die Spins können auch miteinander wechselwirken. Die einfachste und eine überraschend allgemeine Möglichkeit ist eine Kopplung zwischen benachbarten Spins. Diese Kopplung wird durch J parametrisiert. Damit erhalten wir den Hamilton-Operator

$H := -J \sum_{\langle ij \rangle} \tau_i \tau_j - h \sum_i \tau_i$

↑ benachbarte Spins

Wenn die Spinwerte nicht diskret sind, wie in der Quantenmechanik, sondern durch kontinuierliche „Kreisel“ dargestellt werden, wie in der klassischen Mechanik, geht es um das Heisenberg-Modell.

Beim Potts-Modell lautet der erste Term  $-J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\tau_i, \tau_j}$ , wobei  $\delta$  die Kronecker-Delta bezeichnet.

Bei  $J > 0$  sprechen wir von einer ferromagnetischen Kopplung ( $\tau_i = \tau_j$  wird bevorzugt), bei  $J < 0$  von einer antiferromagnetischen Kopplung.

Lee-Young-Nullstellen: Eine wesentliche Voraussetzung für die Existenz von Phasenübergängen ist, dass wir den thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  nehmen. Dies kann durch das folgende Argument illustriert werden. Der Einfachheit halber betrachten wir ein 2d Ising-Modell mit  $N=4$  und  $h=0$ , und bestimmen  $Z$ :

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j}$$

Periodische Randbedingungen werden angenommen. Betrachten wir den Beitrag von einigen Konfigurationen:

Spin  $\rightarrow$   $\begin{matrix} + & + \\ \oplus & \oplus \end{matrix}$   $\Rightarrow \delta Z = 2 e^{8\beta J}$

$\delta_i s_j \rightarrow$   $\begin{matrix} + & - \\ \oplus & \ominus \end{matrix}$   $\Rightarrow \delta Z = 8 e^0$

Anzahl Konfigurationen mit diesem Beitrag

$\begin{matrix} + & - \\ \oplus & \ominus \end{matrix}$   $\Rightarrow \delta Z = 8 e^0$

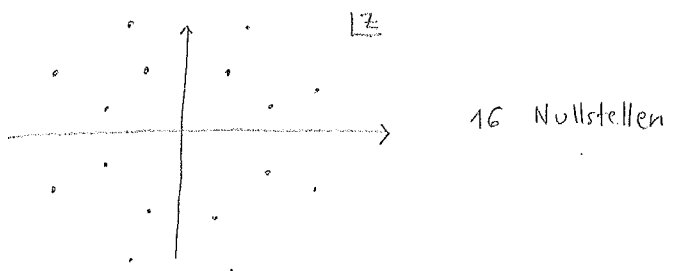
$\begin{matrix} - & - \\ \ominus & \ominus \end{matrix}$   $\Rightarrow \delta Z = 2 e^{-8\beta J}$

$\begin{matrix} - & + \\ \ominus & \oplus \end{matrix}$   $\Rightarrow \delta Z = 4 e^0$

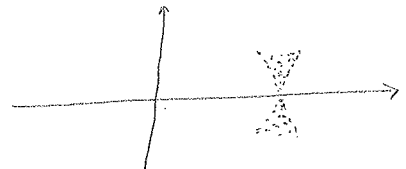
Check:  $2 + 8 + 2 + 4 = 2^4$  ok!

$$\Rightarrow Z = 2 e^{-8\beta J} \{ 1 + 6(e^{\beta J})^8 + (e^{\beta J})^{16} \}$$

Die Idee von Lee und Yang: suche nach den Nullstellen von  $1 + 6z^8 + z^{16} = 0$ ,  $z := e^{\beta J}$ . Dank reeller Koeffizienten sind diese unbedingt komplex-konjugierte Paare:



Wenn  $N \rightarrow \infty$  können die Nullstellen „kondensieren“:



In der Tat gibt es einen Phasenübergang bei  $\beta_c J = \frac{\ln(1+\sqrt{2})}{2}$ .

Lösung / 1d Ising:

Auch wenn es in 1d keinen eigentlichen Phasenübergang gibt, skizzieren wir die Lösung, weil die Methode interessant ist.\*

\* 2d: Onsager 1944  
 3d: heute noch ein sehr aktives Forschungsthema!

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{z_1} \dots \sum_{z_N} \exp \left[ \beta J \sum_{i=1}^N z_i z_{i+1} + \beta h \sum_{i=1}^N z_i \right]_{z_{N+1} := z_1} \\
 &= \sum_{z_1} \dots \sum_{z_N} \prod_{i=1}^N \underbrace{\exp \left[ \beta J z_i z_{i+1} + \frac{\beta h}{2} (z_i + z_{i+1}) \right]}_{=: \hat{T}_{z_i z_{i+1}} \text{ "Transfermatrix" }} \\
 &= \sum_{z_1} \dots \sum_{z_N} \hat{T}_{z_1 z_2} \hat{T}_{z_2 z_3} \dots \hat{T}_{z_N z_1} \\
 &\stackrel{!}{=} \text{Tr}(\hat{T}^N).
 \end{aligned}$$

Explizit gilt  $\hat{T} = \begin{pmatrix} + & - \\ e^{\beta J + \beta h} & e^{-\beta J} \\ - & + \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta h} \end{pmatrix}$

Eigenwerte:  $(\lambda - e^{\beta J + \beta h})(\lambda - e^{\beta J - \beta h}) - e^{-2\beta J} = 0$

$$\Leftrightarrow \lambda^2 - \lambda e^{\beta J} (e^{\beta h} + e^{-\beta h}) + e^{2\beta J} - e^{-2\beta J} = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{e^{\beta J} (e^{\beta h} + e^{-\beta h}) \pm \sqrt{e^{2\beta J} (e^{2\beta h} + 2 + e^{-2\beta h}) - 4e^{2\beta J} + 4e^{-2\beta J}}}{2}$$

$$= e^{\beta J} \left\{ \cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right\} =: \lambda_{\pm}$$

Die Transfermatrix kann jetzt diagonalisiert werden:

$$\hat{T} = \sigma \begin{pmatrix} \lambda_+ & \\ & \lambda_- \end{pmatrix} \sigma^T \Rightarrow Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right]$$

Die freie Energie beträgt

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \left\{ N \ln \lambda_+ + \ln \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right\}$$

Weil  $|\frac{\lambda_-}{\lambda_+}| < 1$  gilt, ist  $\lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N = 0$ . So erhalten wir

$$\begin{aligned}
 F &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} -k_B T N \ln \left\{ e^{\beta J} \left[ \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right] \right\} \\
 &= -N \left\{ J + k_B T \ln \left[ \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

Die Magnetisierung pro Gitterpunkt ist  $\frac{\sinh(\beta h) \cosh(\beta h)}{\sinh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}$

$$\langle z \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} = \frac{\sinh(\beta h) + \frac{\sinh(\beta h) \cosh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}}{\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}}$$

Für  $h \rightarrow 0$  läuft  $\langle z \rangle$  gegen null, d.h. keine spontane Magnetisierung — es sei denn, wir schicken zuerst  $T \rightarrow 0$ ,

$$\beta \rightarrow \infty, e^{-4\beta J} \xrightarrow{J > 0} 0, \text{ wobei } \langle z \rangle \rightarrow \frac{\sinh(\beta h)}{|\sinh(\beta h)|} = \text{sign}(h) = \pm 1.$$