

VI Phasenübergänge

VI.1 Ehrenfest klassifikation

Wir haben an verschiedenen Beispielen gesehen, daß Vielteilchensysteme bei Änderung externer Parameter (Druck, Temperatur, angelegtes Magnetfeld) ihre Eigenschaften in der Regel nicht stark verändern. Bei Änderungen über bestimmte kritische Werte hinweg beobachten wir hingegen drastische Veränderungen.

Wasser bei $T = 5^\circ\text{C}$ und 10°C verhält sich ähnlich

Das tut es auch bei $T = -5^\circ\text{C}$ und $T = -10^\circ\text{C}$ aber es gibt einen großen Unterschied zwischen

$T = -5^\circ\text{C}$	und	$T = +5^\circ\text{C}$
festes Eis		flüssiges Wasser

Man spricht von Phasen und Phasenübergängen

Phasenübergang

Ein thermodynamisches Potential (z.B. die freie Energie) zeigt an einem Wert eines Kontrollparameters (z.B. Temperatur) ein nicht analytisches Verhalten im thermodynamischen Limes

Beispiel: • Ferromagnet $\leftrightarrow$ Paramagnet

$$G.l. (4.35) \quad \frac{A}{Nk_B} = \begin{cases} -T \ln 2 & T > T_c \\ -T \ln 2 + \frac{3}{4} T_c (T - T_c)^2 & T < T_c \end{cases}$$

• van der Waals Gas

• BEC

$$S = Nk_B \begin{cases} \frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \ln z & T > T_c \\ \frac{5}{2} \frac{g_{5/2}(\gamma)}{g_{3/2}(\gamma)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} & T < T_c \end{cases}$$

Ehrenfest Klassifikation

Phasenübergang n'ter Ordnung:

Unstetigkeit in der n' ten Ableitung eines thermodynamischen Potentials nach einem Kontrollparameter, z.B. T , wobei alle Ableitungen bis $n-1$ stetig sind

Ferromagnet $\leftrightarrow$ Paramagnet $dA = -SdT - \vec{B} d\vec{M}$

$$A(T=T_c-0) = A(T=T_c+0)$$

$$\left. \frac{dA}{dT} \right|_{T < T_c} = -\ln 2$$

$$\left. \frac{dA}{dT} \right|_{T > T_c} = -\ln 2 + \frac{3}{2} T_c (T - T_c)$$

$$\left. \frac{dA}{dT} \right|_{T_c-0} = \left. \frac{dA}{dT} \right|_{T_c+0}$$

aber

$$\left. \frac{d^2 A}{dT^2} \right|_{T < T_c} = 0$$

$$\neq \left. \frac{d^2 A}{dT^2} \right|_{T > T_c} = \frac{3}{2} T_c \neq 0$$

Phasenübergang 2. Ordnung

VI.2 Ordnungsparameter universelles Verhalten und kritische Exponenten

Zur Charakterisierung von Phasenübergängen identifiziert man einen (oder mehrere) Ordnungsparameter, die sich bei einem Phasenübergang auf charakteristische Weise ändern.

z.B. $\overline{\psi}(T)$ stetig bei $T=T_c$

aber $\frac{\partial \overline{\psi}(T)}{\partial T}$ unstetig bei $T=T_c$
im thermodynamischen Limit

Beispiele

$$(438) \quad \psi = \begin{cases} M & \text{Ferro} \leftrightarrow \text{Paramagnet} \\ \sqrt{\rho/\rho_c} & \text{Bose-Einstein Kondensation} \\ \frac{n - n_c}{n_c} & \text{flüssig} \leftrightarrow \text{gasförmig} \end{cases}$$

Konvention $\overline{\psi}(T_c) = 0$

oft
(439)

$$\overline{\psi} = \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \neq 0 & T < T_c \end{cases}$$

- Am kritischen Punkt divergieren Korrelationslängen $\Rightarrow$ Details der Physik auf kleinen Längenskalen werden unwichtig

$\Rightarrow$

Systeme zeigen in der Nähe des kritischen Punktes einen Phasenübergang universeller, d.h. von mikroskopischen Details unabhängigen, Verhalten

lediglich globale Eigenschaften wie Dimensionalität, Symmetrien des Ordnungsparameters und Charakter der Wechselwirkung (kurz- oder langreichweitig) spielen eine Rolle

$\Rightarrow$ Basis der Renormierungstheorie

können wir im Rahmen dieser Vorlesung nicht näher besprechen.

universelles Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes heißt algebraische Abhängigkeit vom Kontrollparameter

(440) $\chi = 1 - \frac{\lambda}{\lambda_c}$ z.B. $\lambda = T$

(441)	Ordnungsparameter	$\varphi \sim \tau ^\beta$	$T < T_c$
	spezifische Wärme	$C \sim \tau ^{-\alpha}$	
	Suszeptibilität	$\chi \sim \tau ^{-\gamma}$	
	kritische Isotherme	$h \sim \varphi^\delta$	
	Korrelationslänge	$\xi \sim \tau ^{-\nu}$	

Die Größen

$\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu$ heißen kritische Exponenten

Sie können aus

$$\text{Exponent} = \lim_{T \rightarrow T_c} \frac{d \ln f(T)}{d \tau}$$

extrahiert werden.

Die Werte der kritischen Exponenten können für Phasenübergänge verschiedener physikalischer Systeme gleich sein. Sie definieren Universalitätsklassen

VI.3 Ginzburg Landau Theorie

phänomenologische Beschreibung von Phasenübergängen

Wir betrachten ein geeignetes thermodynamisches Potential, z.B. die Helmholtz freie Energie A in der Nähe eines kritischen Punktes als Funktional des Ordnungsparameters

$$\text{im GG: } A(\bar{\varphi}, T) = \min_{\varphi = \bar{\varphi}} (A(\varphi, T)) \quad (442)$$

$$(4.43) \quad \mathcal{A}(\varphi, T) = A_0(\bar{\varphi}, T) + \left(a(T-T_c) \varphi^2 + u \varphi^4 - h\varphi \right) V$$

Landau Funktional

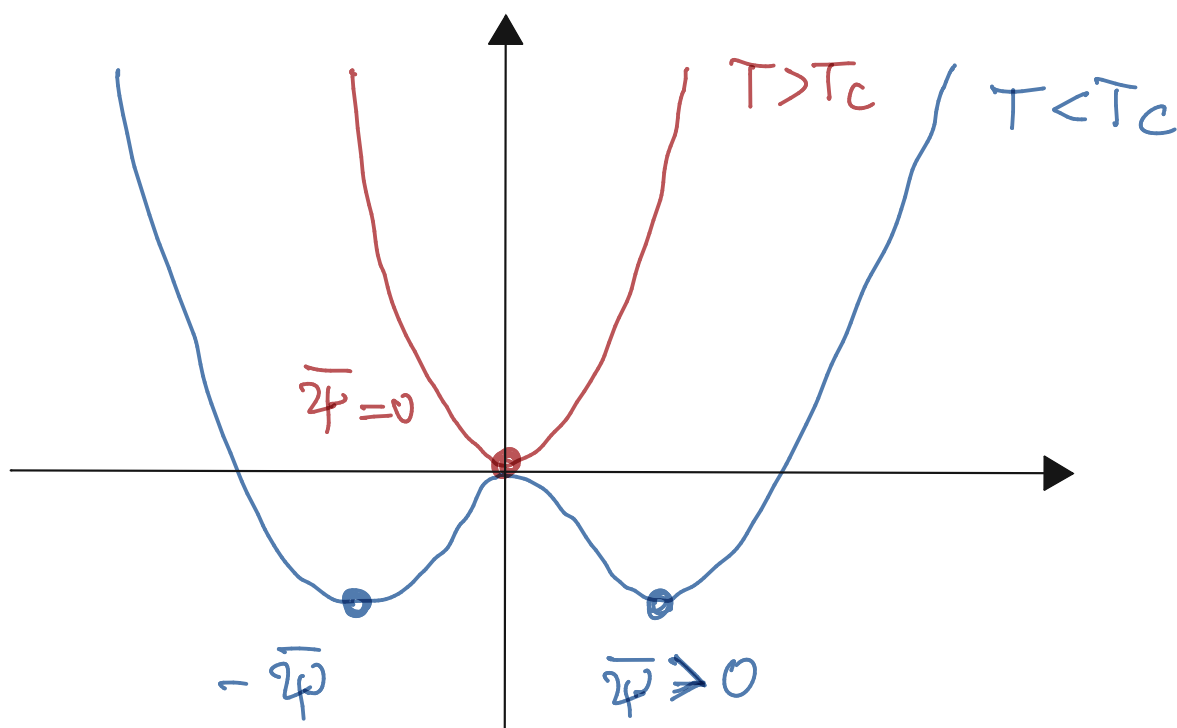
h : externes Magnetfeld (bzw. Veralgemeinerung)

V : Volumen (A ist extensiv)

$$a > 0$$

$$u > 0$$

Parameter



Minimierung von $\mathcal{A}$ bzw φ liefert $\bar{\varphi}$ und A
d.h. Ordnungsparameter und thermodyn. Potential

$$(4.44) \quad \varphi \longrightarrow \bar{\varphi}(T, h)$$

$$(4.45) \quad A(T, h) = \mathcal{A}(T, h, \varphi = \bar{\varphi}(T, h))$$

- Ordnungsparameter

Minimum
($h=0$)

$$\frac{1}{V} \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \varphi^2} = 2a(T-T_c)\varphi^2 + 4u\varphi^3 = 0$$

(446)

$$\overline{\varphi^2}_{h=0} = \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \sqrt{\frac{a}{2u}} (T_c - T)^{1/2} & T < T_c \end{cases}$$

(447) $\Rightarrow$ kritischer Exponent $\beta = \frac{1}{2}$

Beispiele

- Molckularfeldnäherung des Ising Magneten

$$m = \sqrt{3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}$$

- Bose-Einstein Kondensat

$$\sqrt{\xi_0} = \sqrt{\frac{N_0}{N}} = \sqrt{1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}} \sim (T_c - T)^{1/2}$$

Einsetzen von (446) in Funktional $\mathcal{A}$

(447)

$$A(T, h=0) = A_0(T) + \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ -\frac{Va^2}{4u} (T_c - T)^2 & T < T_c \end{cases}$$

- Spezifische Wärme

$$C_h(T, h=0) = -\frac{T}{V} \frac{\partial^2 A(T, h=0)}{\partial T^2}$$

$$(448) \quad C_p(T, h=0) = C_0(T) + \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \frac{a^2}{2u} T & T < T_c \end{cases}$$

↑
analytisch in $T=T_c$

$$(449) \Rightarrow \text{kritischer Exponent} \quad \alpha = 0$$

• Suszeptibilität

Betrachten jetzt ein kleines externes Feld $\delta h \Rightarrow \delta \varphi = ?$

$$\varphi = \overline{\varphi}_{h=0} + \delta \varphi \quad \overline{\varphi}_{h=0} \text{ GG Wert bei } h=0$$

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{1}{V} \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \varphi} = 2a(T-T_c)(\overline{\varphi}_0 + \delta \varphi) + 4u(\overline{\varphi}_0 + \delta \varphi)^3 + \delta h$$

bis in 1. Ordnung in $\delta \varphi$

$$\underbrace{\left[2a(T-T_c)\overline{\varphi}_0 + 4u\overline{\varphi}_0^3 \right]}_{=0} + \left[2a(T-T_c) + 12u\overline{\varphi}_0^2 \right] \delta \varphi = \delta h$$

wegen GG Eigenschaft
bei $h=0$

$\Rightarrow$ Suszeptibilität

(450)

$$\chi = \frac{\delta \bar{\varphi}^2}{\delta h} = \frac{1}{2a(T-T_c) + 12u\bar{\varphi}_0^2} = \begin{cases} \frac{1}{2a(T-T_c)} & T > T_c \\ \frac{1}{4a(T_c-T)} & T < T_c \end{cases}$$

(451) $\Rightarrow$ kritischer Exponent $\gamma' = 1$

Beispiel • MFT Ising Magnet

$$\chi = \begin{cases} \frac{1/b_B}{T-T_c} & T > T_c \\ \frac{1/b_B}{2(T_c-T)} & T < T_c \end{cases}$$

• kritische Isotherme $T = T_c$ $h \neq 0$ $\bar{\varphi}_{h=0} = 0$

$$0 \stackrel{!}{=} \frac{1}{V} \frac{\partial A(T_c, h, \bar{\varphi})}{\partial \bar{\varphi}} = 4u(\delta \bar{\varphi})^3 - h = 0$$

$$(452) \quad \bar{\varphi}(h) = \bar{\varphi}_0 + \delta \bar{\varphi} = \delta \bar{\varphi} = \left(\frac{h}{4u} \right)^{1/3}$$

$$h \sim \bar{\varphi}^3$$

(453) kritischer Exponent $\delta = 3$

- Korrelationslänge

Die Bestimmung der Korrelationslänge erfordert Erweiterung des Landau Funktionals um räumlich inhomogene Eigenschaften zu berücksichtigen

$$\mathcal{H}(T, h, \varphi) = A_0(T)$$

$$+ \int d^3r \left[B(\nabla\varphi)^2 + a(T-T_c)\varphi^2 + u\varphi^4 - h\varphi \right]$$

(454)

Landau-Ginzburg Funktional

hier

- $\varphi \rightarrow \varphi(\vec{r}) \quad h \rightarrow h(\vec{r})$

sowie $\int d^3r$ um Inhomogenitäten zuzulassen

- Abhängigkeit von $\varphi, \nabla\varphi, \dots$
- wegen Symmetrie kein linearer Term in $\nabla\varphi$
- $(\nabla\varphi)^2$ "kinetischer Beitrag"

Minimierung $\rightarrow$ Gleichgewicht

(455)

$$\delta\mathcal{H} = \delta \int d^3r f(\nabla\varphi, \varphi, \vec{r}) = 0$$

Dies kennen wir schon aus der Hamilton'schen Mechanik
 $\Rightarrow$ Euler-Lagrange Gleichungen

$$(456) \quad \frac{\partial f}{\partial \varphi} - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial (\frac{\partial \varphi}{\partial x_j})} = 0$$

Mit $f = B(\nabla \varphi)^2 + a(T-T_c)\varphi^2 + u\varphi^4 - h(\vec{r})\varphi$
 folgt nichtlineare partielle DGL:

$$(457) \quad 2B \Delta \varphi = 2a(T-T_c)\varphi + 4u\varphi^3 - h(\vec{r})$$

London-Ginzburg DGL $\rightarrow$ H.A. Schwierig!

$\Rightarrow$ Näherung

kleines äußeres Feld $h \rightarrow \delta h$

und $\varphi = \underbrace{\varphi_{h=0}}_{\text{konst } \vec{r}} + \delta \varphi(\vec{r})$ Linearisierung

$$(458) \quad 2B \Delta(\delta \varphi(\vec{r})) = 2a(T-T_c)\varphi_0 + 2a(T-T_c)\delta \varphi + 12u\varphi_0^2\delta \varphi - \delta h$$

lineare DGL!

Lösung durch F-Trafo

Ansatz $\delta \varphi(\vec{r}) = \delta \varphi_{\vec{b}} e^{i\vec{b}\vec{r}}$ $\delta h(\vec{r}) = h_{\vec{b}} e^{i\vec{b}\vec{r}}$

(459)

Dies liefert

$$\underbrace{2a(T-T_c)\bar{\psi}_0 + 4u\bar{\psi}_0^3 + (2Bk^2 + 2a(T-T_c) + 12u\bar{\psi}_0^2)}_{=0} \delta\psi_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \delta h_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 0$$

(460)

$$\chi(\vec{k}) = \frac{\delta\psi_{\vec{k}}}{\delta h_{\vec{k}}} = \frac{1}{2Bk^2 + 2a(T-T_c) + 12u\bar{\psi}_0^2}$$

Dies hat die Struktur

$$\chi(\vec{k}) = \frac{\chi}{1 + k^2 \xi^2} = \begin{cases} \frac{1}{2Bk^2 + 2a(T-T_c)} & T > T_c \\ \frac{1}{2Bk^2 + 4a(T_c - T)} & T < T_c \end{cases}$$

(461)

wobei ξ die Korrelationslänge ist, dann

$$\delta\psi(\vec{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta\psi_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\chi}{1 + k^2 \xi^2} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \delta h_{\vec{k}}$$

betrachten nun ein "äußeres Feld bei $\vec{r}=0$ lokalisiert

$$\delta h(\vec{r}) = \delta h_0 \delta^{(3)}(\vec{r})$$

$$\delta h_{\vec{b}} = \int d^3r \delta h_0 \delta(\vec{r}) e^{i\vec{b}\vec{r}} = \delta h_0$$

damit

$$\delta \psi(\vec{r}) = \int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} \frac{\chi}{1 + \eta^2 \xi^2} e^{-i\vec{b}\vec{r}} \delta h_0 \sim e^{-r/\xi}$$

$\Rightarrow$ exponential abklingende Störung

$\Rightarrow$ Korrelationslänge

$$(463) \quad \xi = \begin{cases} \sqrt{\frac{B}{a(T-T_c)}} & T > T_c \\ \sqrt{\frac{B}{2a(T_c-T)}} & T < T_c \end{cases}$$

$\Rightarrow$ kritischer Exponent

$$\nu = \frac{1}{2}$$

(464)

D.h. im Rahmen der phänomenologischen Ginzburg Landau Theorie erhalten wir die folgenden kritischen Exponenten

Ginzburg-Landau

(466)

Ordnungsparameter	$\bar{\psi} \sim \tau ^{1/2}$	$\beta = \frac{1}{2}$
spez. Wärme	$C \sim \tau ^0$	$\alpha = 0$
kritische Isotherme	$h \sim \bar{\psi}^3$	$\delta = 3$
Korrelationslänge	$\xi \sim \tau ^{-1/2}$	$\nu = \frac{1}{2}$
Suszeptibilität	$\chi \sim \tau ^{-1}$	$\gamma = 1$

- Man kann zeigen, daß Ginzburg Landau Modelle im mean-field Fall (d.h. in Molekularfeldnäherung) korrekt beschreibt.
- I.A. sind die Werte der kritischen Exponenten anders und können z.B. im Rahmen der Renormierungsgruppentheorie oder numerisch bestimmt werden.
- Für Gittermodelle mit endlich lang reichender Wechselwirkung gilt für größer werdende (räumliche) Dimension, daß die mean-field Theorie exakt wird. Dies passiert für

(465)
 $d \geq d_c$
 d_c obere kritische Dimension