

Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) SS 17

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina KlierMusterlösung: Blatt 13
Besprechung: 21.07.2017

1. Brechung der kontinuierlichen Symmetrie: (4+15+6=25 Punkte)

Betrachten Sie ein D -dimensionales Gitter mit magnetischen Momenten $\vec{\sigma}_i$, die gezwungen sind in einer Ebene zu liegen, $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y)$. Der Hamilton-Operator des Systems ist (die Summe ist auf nächste Nachbarn im Gitter beschränkt)

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j. \quad (1)$$

Dieser Hamilton-Operator ist invariant bezüglich der simultanen Rotation aller magnetischen Momente in der (x, y) -Ebene. Der Ordnungsparameter des Systems ist ein zweidimensionaler Vektor $\vec{m}(\vec{r}) = \langle \vec{\sigma}_i \rangle$. Bei hohen Temperaturen ist das System in einem paramagnetischen Zustand mit verschwindender mittlerer Magnetisierung. Wenn die Temperatur erniedrigt wird, kann das System in einen ferromagnetischen Zustand übergehen, der die Rotationsinvarianz bricht.

Bemerkung: In der Vorlesung haben wir im Detail die Landau-Theorie mit einem skalaren Ordnungsparameter ϕ besprochen. Eine solche Theorie beschreibt Phasenübergänge, die mit der spontanen Brechung einer diskreten Symmetrie assoziiert sind (z.B. für das Ising-Modell). Es gibt Systeme, in denen der Phasenübergang mit der Brechung einer kontinuierlichen Symmetrie einhergeht. In dieser Aufgabe betrachten wir ein Beispiel dafür, die entsprechende Landau-Theorie und einige ihrer Konsequenzen.

(a) Das Landau-Funktional

$$\mathcal{F}[\vec{m}(\vec{r})] = \int d^D r \left\{ \frac{t}{2} |\vec{m}|^2 + b |\vec{m}|^4 + \frac{K}{2} \left[\left(\vec{\nabla} m_x \right)^2 + \left(\vec{\nabla} m_y \right)^2 \right] \right\},$$

$$\vec{m} = (m_x, m_y), \quad |\vec{m}|^2 = m_x^2 + m_y^2 \quad t = a(T - T_c), \quad a, b, K > 0. \quad (2)$$

wird durch uniforme Konfigurationen des Ordnungsparameters minimiert, $\vec{m}(\vec{r}) = \text{konst.}$ Auf Grund der Rotationssymmetrie können wir $\vec{m}(\vec{r}) = (m_0, 0)$ wählen. Zeigen Sie, dass für $T > T_c$ das Landau-Funktional (2) sein Minimum bei $m_0 = 0$ erreicht, während für $T < T_c$ das Minimum bei $m_0 = \sqrt{|t|/4b}$ liegt.

Lösung:

Wir ersetzen $\vec{m}(\vec{r}) = (m_0, 0)$ in Gl. (2) und minimieren in bezug auf m_0 . Die Sattelpunktgleichung ist

$$m_0(t + 4bm_0^2) = 0. \quad (3)$$

Bei $T > T_c$ ($t > 0$) erreicht das Landau-Funktional \mathcal{F} sein Minimum bei $m_0 = 0$. Bei $T < T_c$ ($t < 0$) liegt das Minimum bei $m_0 = \sqrt{|t|/4b}$.

(b) Betrachten Sie nun Fluktuationen des Ordnungsparameters δm_x und δm_y in der symmetriegebrochenen Phase, $T < T_c$. Bestimmen Sie das Landau-Funktional, das

kleine Fluktuationen des Ordnungsparameters in der Gauss'schen Näherung beschreibt. Mit Hilfe der Fourier-Entwicklung von $\delta m_y(\vec{r})$ (beachten Sie, dass das Feld δm_y reell ist) zeigen Sie, dass die Korrelationsfunktion $\langle \delta m_y(0) \delta m_y(\vec{r}) \rangle$ durch

$$\langle \delta m_y(0) \delta m_y(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{\beta} \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{Kq^2} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \quad (4)$$

gegeben ist. Vergleichen Sie Gl. (4) mit der Korrelationsfunktion der Ordnungsparameterfluktuationen in der skalaren Landau-Theorie, die in der Vorlesung diskutiert wurde.

Lösung: Wir ersetzen $m_x = \sqrt{|t|/4b} + \delta m_x$ und $m_y = \delta m_y$ in Gl. (2) und entwickeln das Landau-Funktional bis zur zweiten Ordnung in Fluktuationen des Ordnungsparameters. Der Teil des Funktionals ohne Ableitungen enthält dann nur δm_x :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{tb}} &= \int d^D r \left\{ \frac{t}{2} (m_0 + \delta m_x)^2 + \frac{t}{2} (\delta m_y)^2 + b[(m_0 + \delta m_x)^2 + (\delta m_y)^2]^2 \right\} \\ &\simeq \text{konst} + \int d^D r \left\{ \underbrace{\left(\frac{t}{2} + 2bm_0^2 \right)}_{=0, \text{ Gl. (3)}} [(\delta m_x)^2 + (\delta m_y)^2] + \underbrace{\frac{4bm_0^2}{2}}_{=-t, \text{ Gl. (3)}} (\delta m_x)^2 \right\}. \end{aligned}$$

Mit dem Term, der Ableitungen enthält,

$$\mathcal{F}_{\text{K}} = \int d^D r \left\{ \frac{K}{2} \left[(\vec{\nabla} m_x)^2 + (\vec{\nabla} m_y)^2 \right] \right\}, \quad (5)$$

erhalten wir in der Gauss'schen Näherung:

$$\mathcal{F} \simeq \text{konst} + \int d^D r \left(\frac{K}{2} (\vec{\nabla} \delta m_x)^2 + |t| (\delta m_x)^2 \right) + \int d^D r \frac{K}{2} (\vec{\nabla} \delta m_y)^2. \quad (6)$$

In der führenden Näherung, Gl. (6), sind die Fluktuationen δm_x und δm_y unabhängig. Der Teil des Landau-Funktional, der Fluktuationen von δm_x beschreibt, ist ähnlich zu seinem Analogon für die skalare Landau-Theorie, die in der Vorlesung besprochen wurde.

Deutlich interessanter sind die Fluktuationen δm_y mit dem Landau-Funktional

$$\mathcal{F}_y = \int d^D r \frac{K}{2} (\vec{\nabla} \delta m_y)^2. \quad (7)$$

Gemäß Gl. (7) sind die Fluktuationen δm_y "masselos": Die Energie für eine Fluktuation $\delta m_y(r)$ mit gegebener Amplitude kann beliebig klein gemacht werden, wenn $\delta m_y(r)$ langsam im Raum variiert. Der Grund für das Auftreten dieser masselosen Mode ist gerade die Brechung einer kontinuierlichen Symmetrie. Die Mode δm_y und ähnliche masselose Moden werden Goldstone-Moden genannt.

Wir sind nun in der Lage den Beitrag von δm_y zu den Fluktuationen des Ordnungsparameters zu untersuchen. Wir interessieren uns für

$$\langle \delta m_y(0) \delta m_y(r) \rangle = \frac{1}{Z} \int (\mathcal{D}\{\delta m_y\}) \delta m_y(0) \delta m_y(r) e^{-\beta \mathcal{F}_y}, \quad (8)$$

$$Z = \int (\mathcal{D}\{\delta m_y\}) e^{-\beta \mathcal{F}_y}. \quad (9)$$

Dazu müssen wir die Funktionalintegrale in Gln. (8) und (9) ausführen. Dafür nutzen wir die Fourier Entwicklung von $\delta m_y(r)$:

$$\delta m_y(r) = \sum_{\vec{q}} [a_{\vec{q}} \exp(i\vec{q}\vec{r}) + a_{\vec{q}}^* \exp(-i\vec{q}\vec{r})]. \quad (10)$$

Die Summation geht über den D -dimensionalen Impuls $\vec{q} = (q_1, \dots, q_D)$ mit $q_i > 0$ (das Feld δm_y reell ist). Das Integrationsmaß im Funktionalintegral kann mittels der Fourierkomponenten wie folgt geschrieben werden:

$$\mathcal{D}\{\delta m_y(r)\} = \prod_{\vec{q}} (d \operatorname{Im} a_{\vec{q}}) (d \operatorname{Re} a_{\vec{q}}). \quad (11)$$

Wir schreiben das Landau Funktional \mathcal{F}_y und das Produkt $\delta m_y(0)\delta m_y(\vec{r})$ mit Hilfe der Fourierkomponenten $a_{\vec{q}}$ um (L die lineare Größe des Systems):

$$\mathcal{F}_y = L^D K \sum_{\vec{q}} q^2 |a_{\vec{q}}|^2, \quad (12)$$

$$\delta m_y(0)\delta m_y(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} (a_{\vec{q}_1} + a_{\vec{q}_1}^*) (a_{\vec{q}_2} \exp(i\vec{q}_2 \vec{r}) + a_{\vec{q}_2}^* \exp(-i\vec{q}_2 \vec{r})). \quad (13)$$

und

$$\begin{aligned} & \int (\mathcal{D}\{\delta m_y\}) \delta m_y(0)\delta m_y(\vec{r}) e^{-\beta \mathcal{F}_y} \\ &= \int \prod_{\vec{q}} (d \operatorname{Im} a_{\vec{q}}) (d \operatorname{Re} a_{\vec{q}}) \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} (a_{\vec{q}_1} + a_{\vec{q}_1}^*) [a_{\vec{q}_2} \exp(i\vec{q}_2 \vec{r}) + a_{\vec{q}_2}^* \exp(-i\vec{q}_2 \vec{r})] e^{-\beta \mathcal{F}_y}. \end{aligned} \quad (14)$$

Da

$$\int (d \operatorname{Im} a_{\vec{q}}) (d \operatorname{Re} a_{\vec{q}}) [a_{\vec{q}} + a_{\vec{q}}^*] e^{L^D K q^2 |a_{\vec{q}}|^2} = 0, \quad (15)$$

sehen wir, dass nur die Terme in Gl. (13) mit $\vec{q}_1 = \vec{q}_2$ zur Korrelationsfunktion beitragen:

$$\begin{aligned} \langle \delta m_y(0)\delta m_y(\vec{r}) \rangle &= \frac{1}{Z} \int (\mathcal{D}\{\delta m_y\}) \delta m_y(0)\delta m_y(\vec{r}) e^{-\beta \mathcal{F}_y} \\ &= \sum_{\vec{q}_1} \frac{\int (d \operatorname{Im} a_{\vec{q}_1}) (d \operatorname{Re} a_{\vec{q}_1}) 2 \cos(\vec{q}_1 \vec{r}) |a_{\vec{q}_1}|^2 e^{-L^D K q_1^2 |a_{\vec{q}_1}|^2}}{\int (d \operatorname{Im} a_{\vec{q}_1}) (d \operatorname{Re} a_{\vec{q}_1}) e^{-L^D K q_1^2 |a_{\vec{q}_1}|^2}} \\ &= \frac{1}{L^D} \sum_{\vec{q}_1} \frac{2 \cos(\vec{q}_1 \vec{r})}{K q_1^2} = \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{K q^2} \exp(i\vec{q}\vec{r}). \end{aligned} \quad (16)$$

- (c) Analysieren Sie die Konvergenz des Integrals (4) bei kleinen \vec{q} und zeigen Sie, dass die spontane Brechung einer kontinuierlichen Symmetrie in $D \leq 2$ Dimensionen nicht möglich ist (Mermin-Wagner-Theorem).

Lösung:

Wir können nun die Größenordnung der Ordnungsparameterschwankungen abschätzen:

$$\langle \delta m_y^2(0) \rangle = \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{K q^2}. \quad (17)$$

Dieses Integral divergiert bei großen Impulsen für $D \geq 2$. Das ist aber kein problem. Die Divergenz kann einfach durch die $1/a$ regularisiert werden, wobei a der Gitterabstand im anfänglichen mikroskopischen Modell ist. In $D \leq 2$ divergiert das Integral bei kleinen Impulsen. Diese Divergenz bedeutet, dass die Schwankungen des Ordnungsparameters immer stark sind und keine weitreichende Ordnung für $D \leq 2$ möglich ist.

Satz von Mermin und Wagner: Kontinuierliche Symmetrien können in ein und zwei Dimensionen nicht in Systemen mit genügend kurzreichweitigen Wechselwirkungen bei endlicher Temperatur spontan gebrochen sein.

2. Flüssigkristall:

(6+6=12 Punkte + 8 Bonuspunkte)

In dieser Aufgabe diskutieren wir Landau-Theorie für Phasenübergänge erster Ordnung. Flüssigkristalle sind Materialien die aus stabförmigen Molekülen bestehen, die eine (langreichweitige) Ordnung in der Orientierung zeigen können ohne in einem festen Zustand zu sein. Der Ordnungsparameter $\phi = \langle 3 \cos^2 \theta - 1 \rangle$ ist ein Maß für die Ordnung in der Orientierung der Moleküle, die den Winkel θ relativ zu einer bevorzugten Achse einnehmen. Da es (im Gegensatz zum ferromagnetischen Fall) keine Symmetrie $\phi \leftrightarrow -\phi$ gibt, müssen wir im Landau-Funktional für den Ordnungsparameter ϕ den kubischen Term in der Entwicklung mitnehmen:

$$\mathcal{F}[\phi(\vec{r})] = \int d^3r \left[\frac{t}{2} \phi^2(\vec{r}) - v \phi^3(\vec{r}) + b \phi^4(\vec{r}) + \frac{K}{2} |\vec{\nabla} \phi(\vec{r})|^2 \right], \quad (18)$$

wobei $t = a \cdot (T - T_0)$ und $a, b, v, K > 0$.

- (a) Skizzieren Sie die Freie-Energiedichte als Funktion von ϕ für verschiedene Temperaturen T . Bestimmen Sie die Übergangstemperatur T_c und den Wert von ϕ bei $T = T_c$.

Lösung:

Freie-Energiedichte für $\phi = \text{konst.}$:

$$f(\phi) = \frac{a(T - T_0)}{2} \phi^2 - v \phi^3 + b \phi^4.$$

Extrema:

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = a(T - T_0)\phi - 3v\phi^2 + 4b\phi^3 = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi = 0 \text{ und } \phi = \phi_{\pm}, \quad (19)$$

$$a(T - T_0) - 3v\phi + 4b\phi^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_{\pm} = \frac{3v \pm \sqrt{9v^2 - 16ab(T - T_0)}}{8b}. \quad (20)$$

Für

$$T < T_0 + \frac{9v^2}{16ab} = T_1$$

sind die Lösungen ϕ_{\pm} reell. Bei der Temperatur T_1 ist $\phi_1 = 3v/(8b)$.

Zweite Ableitung:

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right|_{\phi=0} = a(T - T_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{Minimum für } T > T_0, \quad (21)$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right|_{\phi_{\pm}} = a(T - T_0) - 6v\phi_{\pm} + 12b\phi_{\pm}^2 = -2a(T - T_0) + 3v\phi_{\pm}. \quad (22)$$

Phasenübergang: $f(\phi_+) = f(0) = 0 \Rightarrow$

$$\frac{a(T - T_0)}{2} - v\phi_+ - \underbrace{\frac{a(T - T_0) - 3v\phi_+}{4}}_{=b\phi_+^2 \text{ aus Gl. (20)}} = \frac{a(T - T_0) - v\phi_+}{4} = 0$$

$$\Rightarrow T_c = T_0 + \frac{v^2}{2ab}. \quad (23)$$

Sobald die kritische Temperatur T_c erreicht ist, erhalten wir sofort einen geordneten Zustand mit $\phi = \phi_+$. Wie wir unten sehen werden, gibt es bei $T = T_c$ einen endlichen Sprung in der Entropie (erste Ableitung der freien Energie), da es mehrere degenerierte Minima gibt. So ist es ein Phasenübergang erster Ordnung.

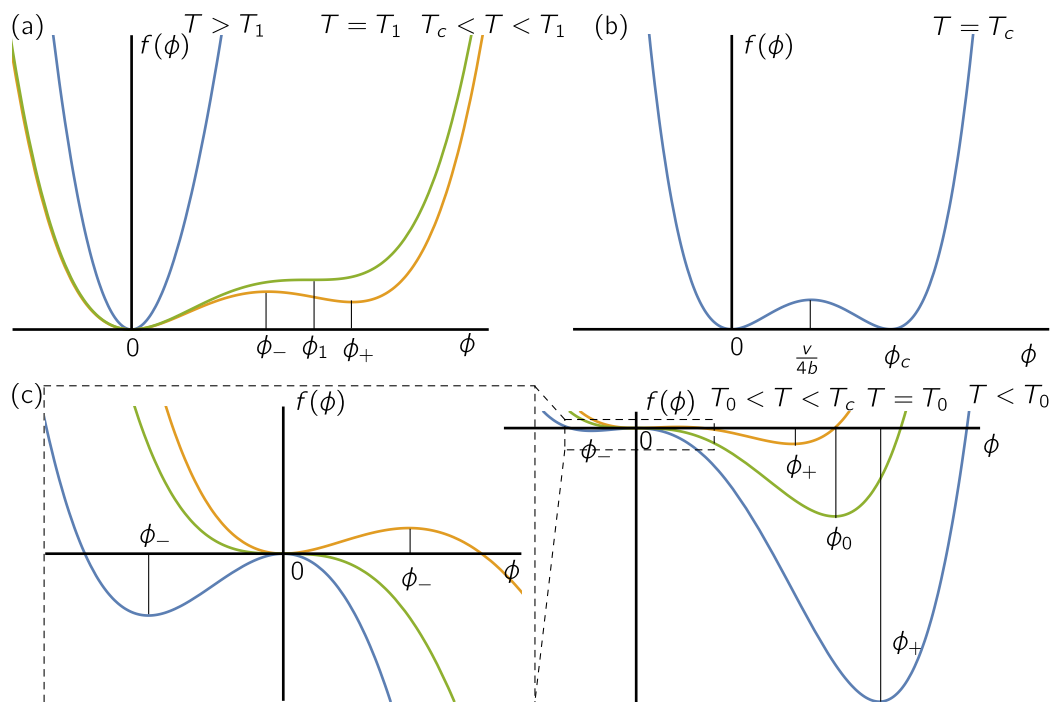
Wert von ϕ bei $T = T_c$:

$$\phi_c = \phi_+(T_c) = \frac{3v}{8b} \left[1 + \sqrt{1 - \frac{16ab}{9v^2}(T_c - T_0)} \right] = \frac{v}{2b}. \quad (24)$$

Weiterhin ist interessant, dass bei $T = T_0$ folgende Werte annimmt

$$\phi_-(T = T_0) = 0, \quad \phi_+(T = T_0) = \phi_0 = \frac{3v^2}{4b} \quad (25)$$

Verlauf von $f(\phi)$:



(a) beschreibt das Verhalten für $T > T_c$, (b) für $T = T_c$ und (c) für $T < T_c$

- (b) Bei einem Phasenübergang 1. Ordnung ist die Entropie bei der kritischen Temperatur diskontinuierlich. Berechnen Sie die Entropie S für T unmittelbar oberhalb bzw. unterhalb T_c . Bestimmen Sie die latente Wärme $Q_l = T \Delta S$ des Phasenübergangs.

Lösung:

Latente Wärme:

$$Q_l = T \Delta S, \quad \Delta S = S(T = T_c + \delta) - S(T = T_c - \delta) \equiv S_{>} - S_{<}$$

Die T -Abhängigkeit des Ordnungsparameters ϕ muss mitgenommen werden, denn aus dem Funktional der freien Energiedichte wird die physikalische freie Energie $F(T) = V f(T, \phi(T))$ im Gleichgewicht erst durch Einsetzen des Gleichgewichtswertes $\phi(T)$ bestimmt.

Entropie:

$$\frac{S}{V} = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial T} = -\left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)_T \frac{\partial \phi}{\partial T} - \left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_\phi,$$

$$T = T_c + \delta : \quad \phi(T) = 0, \quad \frac{\partial \phi(T)}{\partial T} = 0 \quad \text{für alle } T > T_c \quad \rightarrow \quad S_{>} = 0,$$

$$T = T_c - \delta : \quad \left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)_T = \left.\frac{\partial f}{\partial \phi}\right|_{\phi_+} = 0, \quad \left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_\phi = \left.\frac{\partial f}{\partial T}\right|_{\phi_+} = \frac{Va}{2} \phi_+^2$$

Damit folgt

$$Q_l = -T_c S_{<} = \frac{1}{2} V T_c a \phi_+^2(T_c) = V \frac{av^2}{8b^2} \left(T_0 + \frac{v^2}{2ab}\right). \quad (26)$$

- (c) Nehmen Sie an, dass das System nur geringfügig **unter** seiner Übergangstemperatur liegt. Betrachten Sie ein Tröpfchen der Größe L und der Breite der Grenzfläche l_0 , mit der geordneten Phase innen und der metastabilen Phase draußen. Bestimmen Sie den kritischen Keimbildungsradius und die Energie eines Keimbildungströpfchens. **(8 Bonuspunkte).**

Lösung:

Unter der Annahme, dass das System nur minimal unter seiner Übergangstemperatur liegt, ist die ungeordnete Phase bereits metastabil (besitzt ein lokales Minimum). Der Ordnungsparameter nimmt sowohl den Wert $\phi(T_c^+) = 0$ über als auch den Wert

$$\phi(T_c^-) = \phi_c$$

unter der Übergangstemperatur an.

Das Problem vereinfacht sich, wenn man die Variablen mit

$$\phi = \psi + \frac{v}{4b}$$

verschiebt. Dies eliminiert einen kubischen Term $\propto \psi^3$ in $f(\psi)$. Für T nahe T_c erhalten wir

$$f(\psi) = \text{konst} + \frac{K}{2} (\vec{\nabla}\psi)^2 - h\psi - \frac{\tilde{a}}{2}\psi^2 + b\psi^4 \quad (27)$$

mit

$$\tilde{a} = \frac{v^2}{4b}, \quad h = \frac{av}{4b} (T_c - T).$$

Wir gehen von einem Tröpfchen der Größe L aus mit einer Grenzflächenbreite l_0 , wobei sich innerhalb des Tröpfchens die stabile Lösung mit $\phi = \phi_+$ und außerhalb die metastabile Lösung $\phi = 0$ befindet. Für kleine Felder h representieren die zwei Ordnungsparameter

$$\psi_G \approx \psi_c = \phi_c - \frac{v}{4b} = \sqrt{\frac{\tilde{a}}{4b}}$$

und

$$\psi_U = 0 - \frac{v}{4b} = -\sqrt{\frac{\tilde{a}}{4b}}$$

die geordneten (G) bzw. die ungeordneten (U) Zustände bei $T < T_c$.

Um ein geordnetes Tröpfchen (“Bubble”) innerhalb des ungeordneten Zustandes zu bilden kostet dies Oberflächenenergie. Unter der Annahme einer kontinuierlichen Veränderung des Ordnungsparameters von ψ_G zu $\psi_U = -\psi_G$ innerhalb der Grenzfläche kann die Grenzflächenenergie wie folgt approximiert werden:

$$E_{\text{surf}} \sim L^{D-1} l_0 \left[K \left(\frac{\psi_G}{l_0} \right)^2 + \tilde{a} \psi_G^2 \right]. \quad (28)$$

Hier ist $L^{D-1} l_0$ das Volumen der Grenzfläche, der Term $K \psi_G^2 / l_0^2$ kommt von $(\nabla \psi)^2$, und $\tilde{a} \psi_G^2$ ergibt sich aus den quadratischen und quartischen Termen der freien Energie und beschreibt die zwischen 0 und ϕ_+ befindliche Barriere, s. Abbildung (b). Die Oberflächenenergie ist die Differenz zwischen der Energien der Grenzfläche mit veränderlichem ψ und der Energie der homogenen geordneten Phase innerhalb des gleichen Volumens $L^{D-1} l_0$. Unter Minimierung der Oberflächenenergie bezüglich l_0 erhalten wir

$$l_0 \sim \left(\frac{K}{\tilde{a}} \right)^{1/2}. \quad (29)$$

Ersetzen dieses Wertes in der Oberflächenenergie ergibt

$$E_{\text{surf}} \sim L^{D-1} \frac{\tilde{a}^{3/2}}{b}. \quad (30)$$

Der Term, der die Energie im Inneren des Tröpfchens beschreibt, ist um den Betrag des linearen Terms in $f(\psi)$ kleiner als die Energie des gleichen Volumens gefüllt mit einer geordneten Phase:

$$E_{\text{bulk}} = -L^D \psi_G h. \quad (31)$$

Die Gesamtenergie des Tröpfchens ergibt sich aus der Summe des Oberflächenterms und des Terms im Inneren:

$$E_{\text{bubble}} = E_{\text{surf}} + E_{\text{bulk}} \sim L^{D-1} \sqrt{\frac{\tilde{a}}{b}} \left(\frac{\tilde{a}}{\sqrt{b}} - Lh \right). \quad (32)$$

Durch Maximieren der Gesamtenergie bezüglich der Tröpfchengröße L (die zweite Ableitung ist negativ), ergibt sich

$$L \sim \frac{\tilde{a}}{\sqrt{bh}}. \quad (33)$$

Dies bedeutet, dass sobald das Tröpfchen die Größe $\tilde{a}/(\sqrt{bh})$ erreicht hat, wird es sich immer weiter ausbreiten (wie kleine Eiskristalle in gefrierendem Wasser). Schließlich können wir die erhaltene Tröpfchengröße in die Gesamtenergie einsetzen und erhalten

$$E_{\text{bubble}} \sim \frac{\tilde{a}^D}{b^{D/2} h^D} h \frac{\tilde{a}^{1/2}}{b^{1/2}} \sim \frac{\tilde{a}^{D+1/2}}{b^{D/2+1/2} h^{D-1}}. \quad (34)$$

Indem wir h und a in Abhängigkeit der ursprünglichen Parameter ausdrücken führt dies zu:

$$E_{\text{bubble}} \sim \frac{v^{D+2}}{b^{D/2+2} a^{D-1} (T_c - T)^{D-1}}. \quad (35)$$

3. Ferroelektrisches Kristall:

(10+10+5=25 Punkte)

In einem ferroelektrischen Kristall entsteht unterhalb einer Übergangstemperatur T_c eine spontane Verzerrung ψ der Einheitszelle, verbunden mit einem Dipolmoment \vec{P} . Das Freie-Energiedichte-Funktional für die beiden Ordnungsparameter $\eta = |\vec{P}|$ und ψ lautet

$$f(\eta, \psi) = a(T - T_0)\eta^2 + b\eta^4 + c\eta^6 + d\psi\eta^2 + \frac{g}{2}\psi^2, \quad T_0, a, b, c, d, g > 0.$$

- (a) Bestimmen Sie den Gleichgewichtswert $\psi = \psi_G(\eta)$ und damit das Freie-Energiedichte-Funktional $\tilde{f}(\eta) = f(\eta, \psi_G(\eta))$. Skizzieren Sie den Verlauf von $\tilde{f}(\eta)$ für verschiedene Temperaturen T in drei Fällen: $\tilde{b} > 0$, $\tilde{b} = 0$ und $\tilde{b} < 0$, wobei

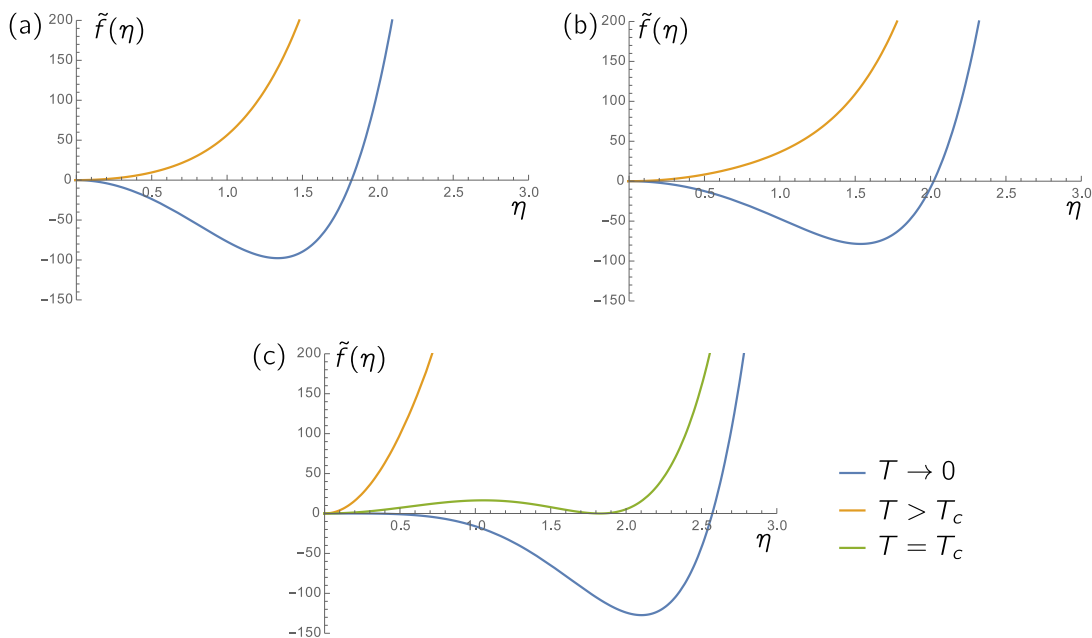
$$\tilde{b} = b - \frac{d^2}{2g}.$$

Begründen Sie, dass ein Phasenübergang 1. Ordnung auftreten kann.

Lösung: Zunächst wird der Gleichgewichtswert von ψ bestimmt (Gleichgewicht eigentlich nur, wenn auch η bestimmt und eingesetzt wird ...) und damit das Funktional $\tilde{f}(\eta)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \psi} = 0 = d\eta^2 + g\psi &\Rightarrow \psi = -\frac{d}{g}\eta^2 \\ \Rightarrow \tilde{f}(\eta) = a(T - T_0)\eta^2 + \underbrace{\left(b - \frac{d^2}{2g}\right)}_{=\tilde{b}}\eta^4 + c\eta^6. \end{aligned} \quad (36)$$

Qualitativer Verlauf von $\tilde{f}(\eta)$:



- $\tilde{b} \geq 0$: Für große Temperatur gibt es ein Minimum bei $\eta = 0$, für kleine T unter einer bestimmten Temperatur T_c ein Minimum bei endlichen η_0 ($\eta_0 \rightarrow 0$ für $T \rightarrow T_c$) und ein Maximum bei $\eta = 0$
 \Rightarrow Phasenübergang 2. Ordnung bei T_c

$\tilde{b} < 0$: Für große Temperatur gibt es ein Minimum bei $\eta = 0$, für $T \rightarrow 0$ ein Minimum bei endlichen η , und bei einer bestimmten Temperatur T_c dazwischen entarten gerade die Minima, $\tilde{f}(\eta_c) = \tilde{f}(0) = 0$. Von $T > T_c$ kommend wird also der Ordnungsparameter η von $\eta = 0$ zu $\eta = \eta_c$ springen
 \Rightarrow Phasenübergang 1. Ordnung bei T_c .

- (b) Berechnen Sie die kritische Temperatur T_c , bei der dieser Übergang 1. Ordnung stattfindet. Bestimmen Sie näherungsweise $\eta(T)$ und $\psi(T)$ in der Nähe von T_c . Finden Sie die latente Wärme des Übergangs.

Lösung:

Kritische Temperatur T_c :

Für T_c bei $\tilde{b} < 0$ brauchen wir den Wert η_c des Ordnungsparameters, also die Position des Minimums:

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \eta} = 2\eta[a(T - T_0) + 2\tilde{b}\eta^2 + 3c\eta^4] \Rightarrow \eta = 0 : \text{Extremum}, \quad (37)$$

$$0 = a(T - T_0) + 2\tilde{b}\eta^2 + 3c\eta^4 \Rightarrow \eta_{\pm}^2 = \underbrace{\left(-\frac{\tilde{b}}{3c}\right)}_{>0} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{3ac}{\tilde{b}^2}(T - T_0)}\right]. \quad (38)$$

Für $T > T_0 + \tilde{b}^2/(3ac)$ hat $\tilde{f}(\eta)$ nur ein Extremum bei $\eta = 0$.

Für $T_0 < T < T_0 + \tilde{b}^2/(3ac)$ haben wir drei Extrema: $\eta = 0$ und η_{\pm} .

Für $T < T_0$ von η_{\pm} ist nur η_+ reell $\Rightarrow \eta_0 = \eta_+$.

Zweite Ableitung:

$$\left. \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial^2 \eta} \right|_{\eta=0} = 2a(T - T_0) \Rightarrow \eta = 0 \text{ Minimum für } T > T_0. \quad (39)$$

Für $T_0 < T < T_0 + \tilde{b}^2/(3ac)$ ist die zweite Ableitung positiv (Minimum) für $\eta = \eta_+$ und negativ (Maximum) für $\eta = \eta_-$:

$$\left. \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial^2 \eta} \right|_{\eta_{\pm}} = \frac{8\tilde{b}^2}{3c} \left[1 - \frac{3ac}{\tilde{b}^2}(T - T_0) \pm \sqrt{1 - \frac{3ac}{\tilde{b}^2}(T - T_0)}\right]. \quad (40)$$

D.h., η_+ ist der Gleichgewichtswert, den η für $T < T_c$ annimmt.

Der Wert von T_c folgt nun aus der Bedingung, dass die beiden Minima bei $\eta = 0$ und $\eta = \eta_+$ energetisch entartet sind bzw. eine zweite Nullstelle $\tilde{f}(\eta_+)$ erscheint:

$$0 = \tilde{f}(0) = \tilde{f}(\eta_+) = -(\tilde{b} + 2c\eta_+^2)\eta_+^4 \Rightarrow -\frac{\tilde{b}}{2c} = \eta_+^2(T_c). \quad (41)$$

Einsetzen von η_+ aus Gl. (38):

$$\Rightarrow T_c = T_0 + \frac{\tilde{b}^2}{4ac} = T_0 + \frac{1}{4ac} \left(b - \frac{d^2}{2g}\right)^2. \quad (42)$$

Verlauf von $\eta(T)$ bei $T \approx T_c$:

$$\left. \begin{array}{l} T = T_c - \delta : \eta(T) = \eta_+(T_c) \\ T = T_c + \delta : \eta(T) = 0 \end{array} \right\} \rightarrow$$

$$\eta_c = \eta(T)|_{T \approx T_c} = \eta_+(T_c) \Theta(T_c - T) = \sqrt{\frac{|\tilde{b}|}{2c}} \Theta(T_c - T).$$

Verlauf von $\psi(T)$ bei $T \approx T_c$:

$$\psi = -\frac{d}{g}\eta^2 \quad \rightarrow \quad \psi_c = \psi(T)|_{T \approx T_c} = -\frac{d \cdot |\tilde{b}|}{2cg} \Theta(T_c - T).$$

Latente Wärme :

Entropie (analog zu Aufgabe 2b):

$$\frac{S}{V} = -2\eta \left[a(T - T_0) - 2\tilde{b}\eta^2 + 3c\eta^4 \right] \frac{\partial \eta}{\partial T} - a\eta^2,$$

$$T = T_c + \delta : \quad S_{>} = 0,$$

$$T = T_c - \delta : \quad \eta(T) = \eta_+(T), \quad S_{<} = Va\eta_+^2$$

Damit folgt $Q_l = -T_c S_{<} = V T_c a \eta_+^2(T_c)$,

$$\eta_+^2(T_c) = \frac{|\tilde{b}|}{2c} \text{ von oben} \quad \Rightarrow \quad Q_l = V T_c \frac{a}{2c} \left(\frac{d^2}{2g} - b \right).$$

(c) Berechnen Sie den kritischen Exponenten β in $\langle \eta \rangle \propto (T_c - T)^\beta$ für den Fall $\tilde{b} = 0$.

Lösung:

Für $\tilde{b} = 0$ lautet das Freie-Energiedichte

$$\tilde{f}(\eta) = a(T - T_0)\eta^2 + c\eta^6. \quad (43)$$

Die Position des Minimums:

$$\frac{\partial \tilde{f}(\eta)}{\partial \eta} = 2\eta [a(T - T_0) + 3c\eta^4] = 0. \quad (44)$$

Für $T > T_0$ gibt es nur ein Extremum (Minimum bei $\eta = 0$). Für $T < T_0$ haben wir zwei Extrema (Maximum bei $\eta = 0$ und Minimum bei $\eta = \eta_0$), wobei

$$\eta_0 = \left[\frac{a}{3c}(T_0 - T) \right]^{1/4}.$$

Damit folgt $T_c = T_0$ und

$$\beta = 1/4. \quad (45)$$