Universität Karlsruhe (TH)
Research University • founded 1825

Karlsruhe Institute of Technology

Sommer-Semester 2009

Theoretische Physik F
Statistische Physik

Dozent: Alexander Shnirman
Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Mi 11:30-13:00, Lehmann Raum 022, Geb 30.22
Fr 09:45-11:15, Lehmann Raum 022, Geb 30.22

http://www-tkm.physik.uni-karlsruhe.de/lehre/theoF.SS09/

Phasenübergänge

Beispiel: der Ferromagnetismus im Heisenberg-Modell

Erinnerung: Magnetische Größen

$\vec{\mathbf{B}} = \mathrm{rot}\vec{\mathbf{A}}$ Magnetische Induktion

$\vec{\mathbf{M}}$ Magnetisierung $\langle \vec{j}_{\mathrm{geb}} \rangle = \frac{d\vec{\mathbf{P}}}{dt} + c(\vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{M}})$

$\vec{\mathbf{H}} \equiv \vec{\mathbf{B}} - 4\pi\vec{\mathbf{M}}$ Magnetfeld

$$dU_{\mathrm{Feld}} = \int dV \left(\frac{\vec{\mathbf{E}} \cdot d\vec{\mathbf{D}} + \vec{\mathbf{H}} \cdot d\vec{\mathbf{B}}}{4\pi} \right)$$ Energie des e.-m. Feldes

Vom magnetischen System geleistete Arbeit $\delta W = -dU_{\mathrm{Feld}}$

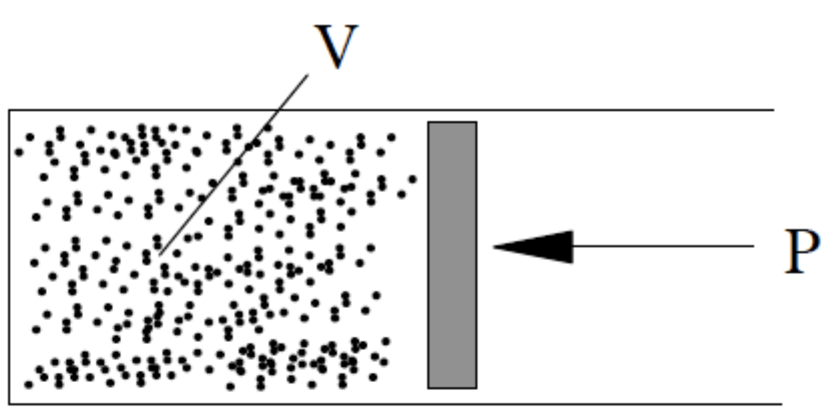
$\delta W = -\vec{H} d\vec{M}$ für $\vec{H} - const.$

Vom magnetischen System geleistete Arbeit

Vom magnetischen System geleistete Arbeit

$\delta W = -\vec{H} d\vec{M}$ für $\vec{H} - const.$

Analog zu



$\delta W = PdV$ mechanische Arbeit

Thermodynamische Potentiale

Innere Energie

$$dU = TdS + \vec{H}d\vec{M}$$

$$\boxed{U = U(S, \vec{M})}$$

$$T = \frac{\partial U}{\partial S}\Big|_{\vec{M}} \qquad \vec{H} = \frac{\partial U}{\partial \vec{M}}\Big|_{S}$$

Thermodynamische Potentiale

Freie Energie

$$F = U - TS$$

$$dF = -SdT + \vec{H}d\vec{M}$$

$$\boxed{F = F(T, \vec{M})}$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}\bigg|_{\vec{M}} \qquad \vec{H} = \frac{\partial F}{\partial \vec{M}}\bigg|_{T}$$

Thermodynamische Potentiale

Enthalpie

$$H = U - \vec{H}\vec{M}$$

$$dH = TdS - \vec{M}d\vec{H}$$

$$\boxed{H = H(S, \vec{H})}$$

$$T = \frac{\partial H}{\partial S}\bigg|_{\vec{H}} \qquad \vec{M} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{H}}\bigg|_{S}$$

Thermodynamische Potentiale

Freie Enthalpie

$$G = H - TS$$

$$dG = -S dT - \vec{M} d\vec{H}$$

$$\boxed{G = G(T, \vec{H})}$$

$$S = -\frac{\partial G}{\partial T}\bigg|_{\vec{H}} \qquad \vec{M} = -\frac{\partial G}{\partial \vec{H}}\bigg|_{T}$$

Heisenberg-Modell

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - g\mu_{\mathrm{B}} \vec{B}_{\mathrm{ext}} \sum_i \vec{S}_i$$

$$\vec{B}_{ext} \equiv \vec{H}$$

äußeres Feld

$$\mu_{\mathrm{B}} = \frac{e}{2mc}$$

g gyromagnetisches Verhältnis

Der Hamilton-Operator entspricht der Enthalpie

$$U = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \vec{S}_i \vec{S}_j \rangle$$

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = U - \vec{H}\vec{M}$$

$$\vec{M} = g\mu_{\mathrm{B}} \sum_i \langle \vec{S}_i \rangle$$

Der Hamilton-Operator entspricht der Enthalpie

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = U - \vec{H}\vec{M}$$

Freie Enthalpie

$$G(T, \vec{H}) = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle - TS = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z$$

Z - Zustandssumme bei festem $\vec{H} = \vec{B}_{\mathrm{ext}}$

G wird häufig "freie Energie" genannt

Richtige freie Energie $F(T, \vec{M}) = U - TS = G + \vec{H}\vec{M}$

Freie Spins: Paramagnetismus

$$\hat{\mathcal{H}} = -g\mu_{\mathrm{B}}\vec{H}\sum_i \vec{S}_i = -h\sum_i \sigma_{z,i}$$

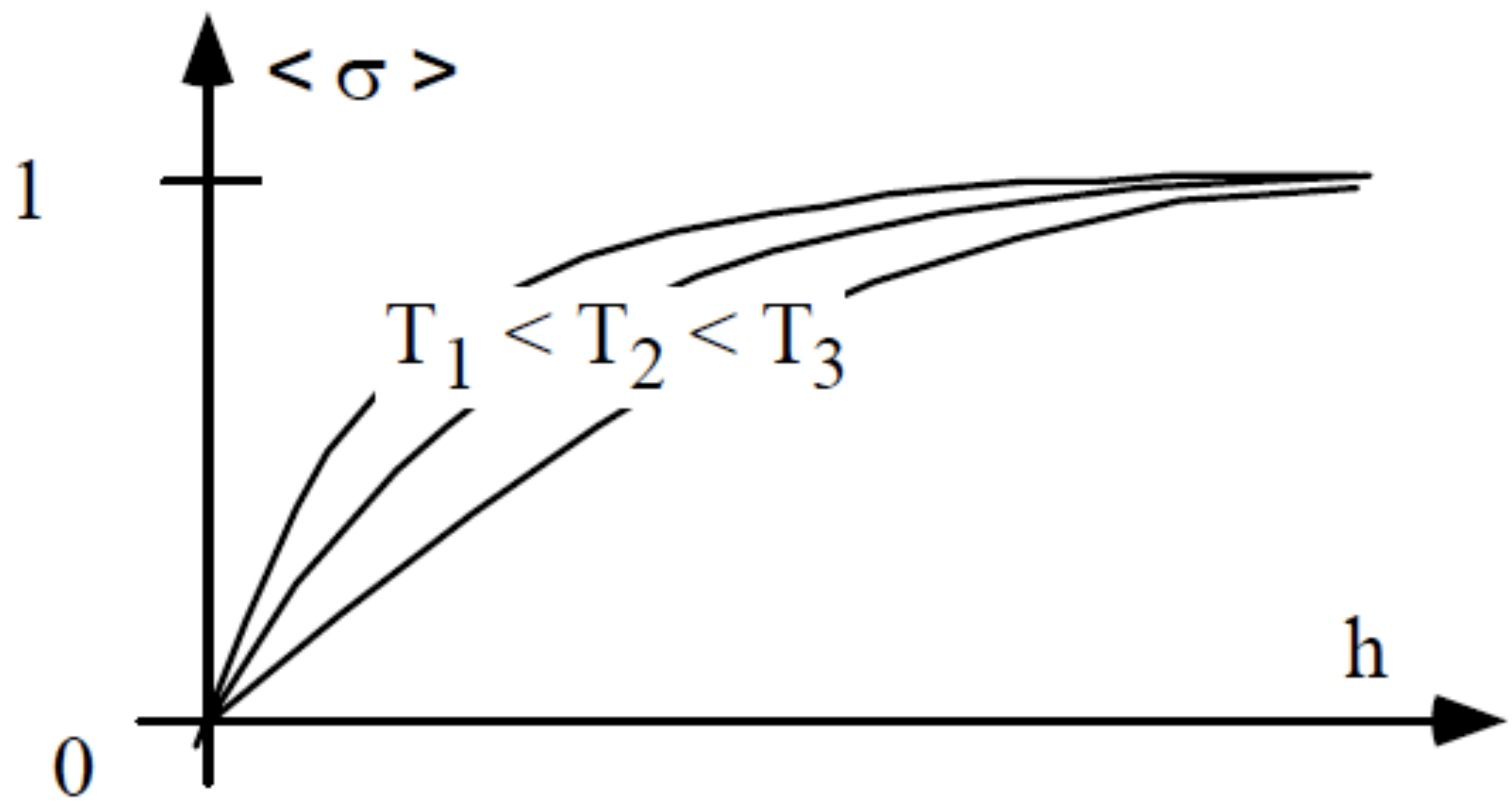
$\vec{B}_{ext} \equiv \vec{H}$

äußeres Feld

$$h \equiv \frac{g\mu_{\mathrm{B}}\hbar|\vec{H}|}{2}$$

$$G(T,\vec{H}) = -\frac{1}{\beta}\ln Z = -\frac{N}{\beta}\ln\left[2\cosh(\beta h)\right]$$

$$\vec{M} = -\frac{\partial G}{\partial \vec{H}}\Big|_T = \frac{g\mu_{\mathrm{B}}\hbar}{2}N\left\langle\sigma_z\right\rangle = \frac{g\mu_{\mathrm{B}}\hbar}{2}N\ \tanh(\beta h)$$



$$\vec{M} = \frac{g\mu_\mathrm{B}\hbar}{2}\, N\,\langle \sigma_z \rangle = \frac{g\mu_\mathrm{B}\hbar}{2}\, N\, \tanh(\beta h)$$

Ferromagnetisches Heisenberg-Modell

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - g\mu_{\mathrm{B}} \vec{B}_{\mathrm{ext}} \sum_i \vec{S}_i$$

$$\vec{B}_{ext} \equiv \vec{H}$$

äußeres Feld

Mit Pauli-Matrizen

$$h \equiv \frac{g\mu_{\mathrm{B}}\hbar|\vec{H}|}{2}$$

$$\hat{\mathcal{H}} = -J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j - h \sum_i \sigma_{z,i}$$

$$J_0 \equiv \frac{\hbar^2 J}{4}$$

Ferromagnetismus: $J > 0$

Heisenberg-Modell: Molekularfeld-Näherung

(mean field)

$$\hat{\mathcal{H}} = -J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j - h \sum_i \sigma_{z,i} = -\sum_i (\vec{h} + \hat{\vec{h}}^{(i)}_{\mathrm{MF}}) \vec{\sigma}_i$$

Molekularfeld $\quad \hat{\vec{h}}^{(i)}_{\mathrm{MF}} = J_0 \sum_{j=\mathrm{n.N.(i)}} \vec{\sigma}_i$

MF-Näherung $\quad \vec{h}_{\mathrm{MF}} = \langle \hat{\vec{h}}^{(i)}_{\mathrm{MF}} \rangle = J_0 \sum_{j=\mathrm{n.N.(i)}} \langle \vec{\sigma}_i \rangle = J_0 z \langle \vec{\sigma} \rangle$

z Zahl der n.N.

Heisenberg-Modell: Molekularfeld-Näherung

(mean field)

$$\hat{\mathcal{H}}_{\rm MF} = -\sum_i (\vec{h} + \vec{h}_{\rm MF})\vec{\sigma}_i$$

$$\vec{h}_{\rm MF} = J_0 z \langle \vec{\sigma} \rangle$$

z Zahl der n.N.

$$\langle \vec{\sigma} \rangle = \frac{\vec{h} + \vec{h}_{\rm MF}}{|\vec{h} + \vec{h}_{\rm MF}|} \cdot \tanh(\beta|\vec{h} + \vec{h}_{\rm MF}|) = \frac{\vec{h}_{\rm MF}}{J_0 z}$$

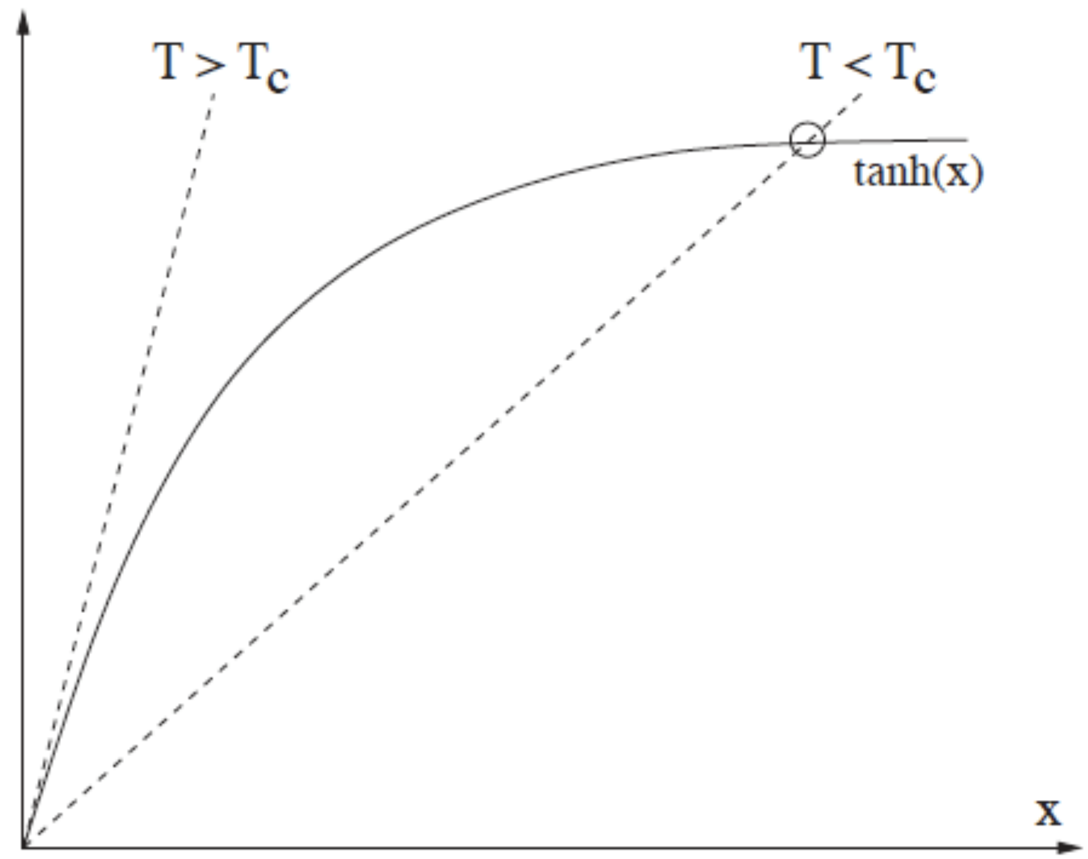
$$\vec{h}_{\rm MF} \parallel \vec{h}$$

$$\tanh(\beta(h + h_{\rm MF})) = \frac{h_{\rm MF}}{J_0 z}$$

$$\tanh(\beta(h + h_{\mathrm{MF}})) = \frac{h_{\mathrm{MF}}}{J_0 z} \qquad \beta h_{\mathrm{MF}} \equiv x$$

$$\tanh(\beta h + x) = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{J_0 z} x$$

für $h = 0$ und $T < T_c$ - zwei Lösungen

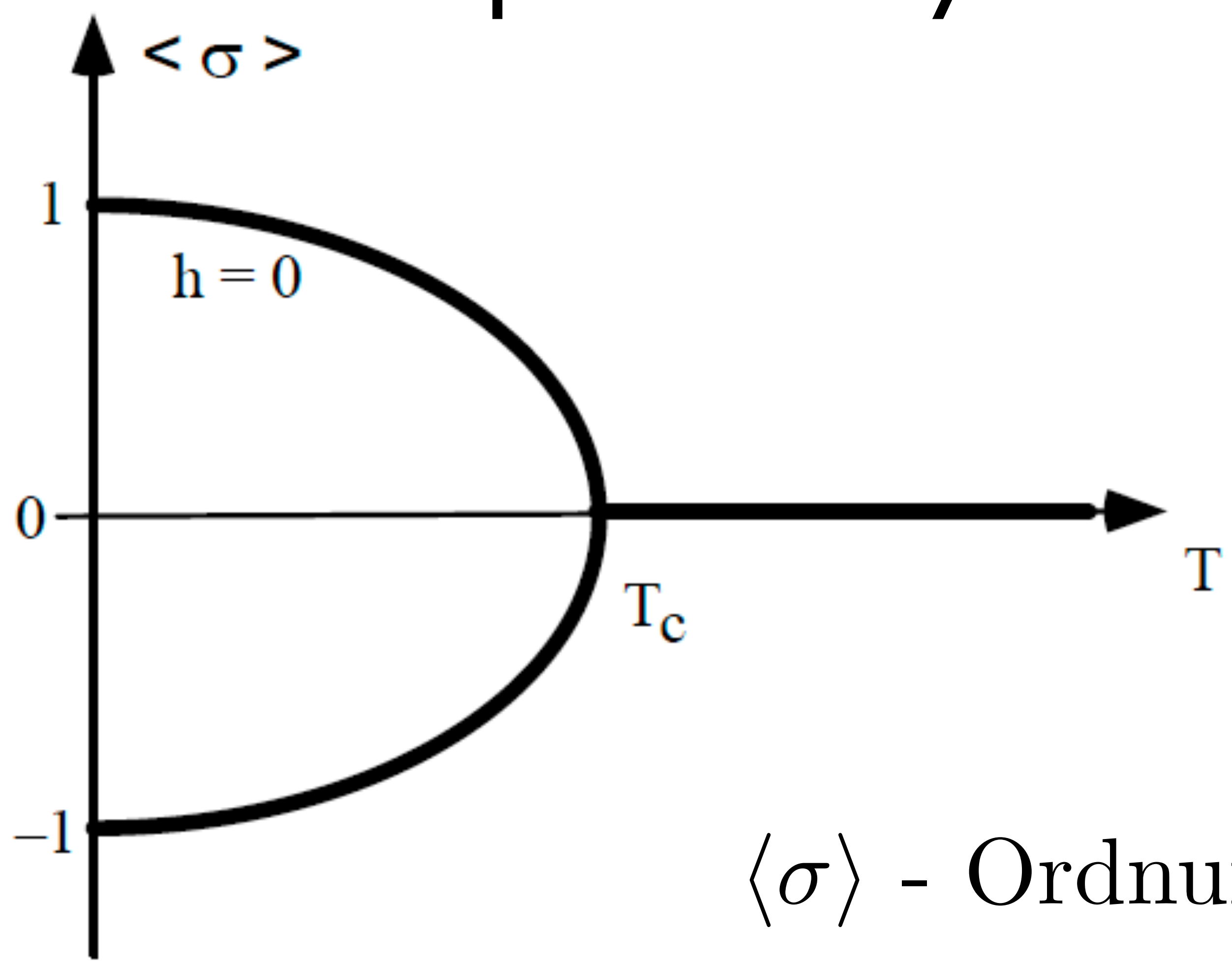


kritische Temperatur

$$k_{\mathrm{B}} T_c = z J_0$$

Phasenübergang

spontane Symmetriebrechung



$\langle\sigma\rangle$ - Ordnungsparameter

MF als Variationsverfahren

$$\hat{\mathcal{H}} = -J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j - h \sum_i \sigma_{z,i}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}} = -\sum_i (h + h_{\mathrm{MF}}) \sigma_{z,i}$$

Variation-Zustandsoperator $\quad W_{\mathrm{MF}} = \frac{1}{Z_{\mathrm{MF}}} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}}}$

Variation-Parameter $\quad h_{\mathrm{MF}}$

MF als Variationsverfahren
Thermodynamisches Potential G

$$G_{\mathrm{var}}(T, h, h_{\mathrm{MF}}) = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\mathrm{MF}} - T S_{\mathrm{MF}} \neq -k_{\mathrm{B}} T \ln Z_{\mathrm{MF}}$$

Variation-Zustandsoperator $\quad W_{\mathrm{MF}} = \frac{1}{Z_{\mathrm{MF}}} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}}}$

Variation-Parameter $\quad h_{\mathrm{MF}}$

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\mathrm{MF}} = \mathrm{Tr}(\hat{\mathcal{H}} W_{\mathrm{MF}}) \qquad S_{\mathrm{MF}} = -k_{\mathrm{B}} \mathrm{Tr}(W_{\mathrm{MF}} \ln W_{\mathrm{MF}})$$

$$\Downarrow$$

$$G_{\mathrm{var}} = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z_{\mathrm{MF}} + \langle \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}} \rangle_{\mathrm{MF}}$$

MF als Variationsverfahren

$$\hat{\mathcal{H}} = -J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j - h \sum_i \sigma_{z,i} \qquad \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}} = -\sum_i (h + h_{\mathrm{MF}}) \sigma_{z,i}$$

$$G_{\mathrm{var}} = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z_{\mathrm{MF}} + \langle \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}} \rangle_{\mathrm{MF}}$$

$$\langle \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j \rangle_{\mathrm{MF}} = \langle \vec{\sigma}_i \rangle_{\mathrm{MF}} \langle \vec{\sigma}_j \rangle_{\mathrm{MF}}$$

Keine Korrelationen im MF-Zustand

$$m(T, h_{\mathrm{MF}}) \equiv \langle \sigma \rangle_{\mathrm{MF}} = \tanh(\beta(h + h_{\mathrm{MF}}))$$

MF-Magnetisierung

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\mathrm{MF}} = -\frac{J_0 z N}{2} m^2 - hNm$$

MF als Variationsverfahren

$$G_{\mathrm{var}} = -k_{\mathrm{B}}T \ln Z_{\mathrm{MF}} + \langle \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}} \rangle_{\mathrm{MF}}$$

$$m = \tanh(\beta(h + h_{\mathrm{MF}})) \qquad \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\mathrm{MF}} = -\frac{J_0 z N}{2} m^2 - hNm$$

$$G_{\mathrm{var}}(T, h, h_{\mathrm{MF}}) = -\frac{J_0 z N}{2} m^2 + h_{\mathrm{MF}} N m - k_{\mathrm{B}} T N \ln\left[2\cosh(\beta(h + h_{\mathrm{MF}}))\right]$$

$$\frac{G_{\mathrm{var}}(T, h, m)}{N} = -\frac{J_0 z}{2} m^2 + k_{\mathrm{B}} T \left(m \,\mathrm{Arctanh}(m) + \frac{1}{2} \ln(1 - m^2) - \ln 2 \right) - hm$$

MF als Variationsverfahren
Thermodynamisches Potential G

$$\frac{G_{\mathrm{var}}(T,h,m)}{N} = -\frac{J_0 z}{2} m^2 + k_{\mathrm{B}} T \left(m\,\mathrm{Arctanh}(m) + \frac{1}{2} \ln(1-m^2) - \ln 2 \right) - hm$$

$$\frac{d}{dx}\mathrm{Arctanh}(x) = \frac{1}{1-x^2}$$

$$\frac{\partial G}{\partial m} = 0$$

$$m = \tanh(\beta(h + J_0 z m))$$

$$h_{\mathrm{MF}} = J_0 z m = J_0 z \langle \sigma \rangle$$

hier waren wir schon!!

Thermodynamisches Potential

$$h \equiv \frac{g \mu_{\mathrm{B}} \hbar |\vec{H}|}{2}$$

$$G(T,\vec{H}) = G_{\mathrm{var}}(T,h,m(h,T))$$

Welche Lösung?

$$\frac{G_{\mathrm{var}}(T,h,m)}{N} = -\frac{J_0 z}{2} m^2 + k_{\mathrm{B}} T \left(m \,\mathrm{Arctanh}(m) + \frac{1}{2} \ln(1-m^2) - \ln 2 \right) - hm$$

$$\frac{\partial G}{\partial m} = 0 \quad \Rightarrow \quad m = \tanh(\beta(h + J_0 z m))$$

$$k_{\mathrm{B}} T_c = z J_0$$

für $T \sim T_c$ **gilt** $m \ll 1$

$$\mathrm{Arctanh}(x) = x + \frac{x^3}{3} + \ldots$$

$$\ln(1-x^2) = -x^2 - \frac{x^4}{2} + \ldots$$

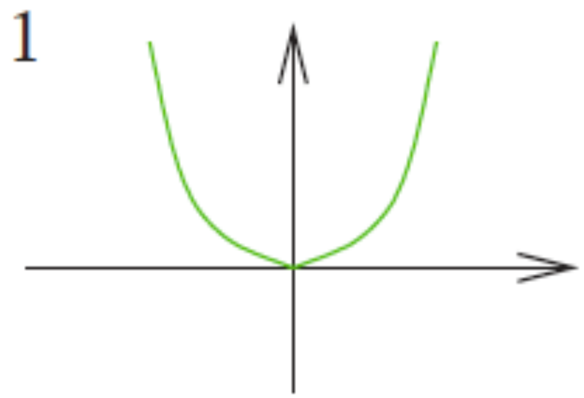
$$\frac{G_{\mathrm{var}}(T,h,m)}{N} \approx \frac{k_{\mathrm{B}}(T-T_c)}{2} m^2 + \frac{k_{\mathrm{B}} T}{12} m^4 - hm - k_{\mathrm{B}} T \ln 2$$

Welche Lösung?

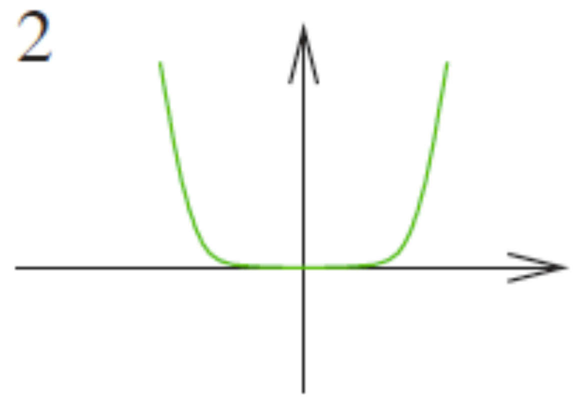
für $T \sim T_c$ gilt $m \ll 1$

$$\frac{G_{\text{var}}(T,h,m)}{N} \approx \frac{k_{\mathrm{B}}(T-T_c)}{2} m^2 + \frac{k_{\mathrm{B}}T}{12} m^4 - hm - k_{\mathrm{B}}T \ln 2$$

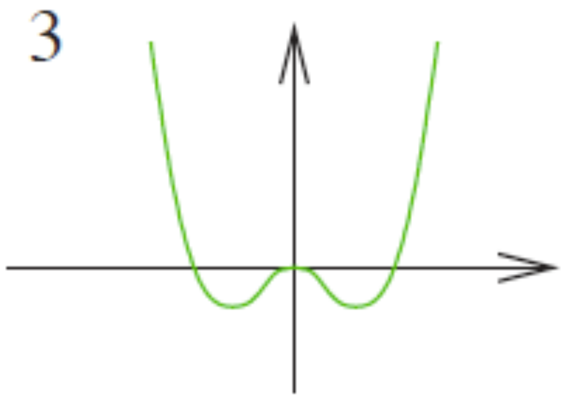
$h = 0$ ohne externes Magnetfeld



$T > T_c$



$T = T_c$



$T < T_c$

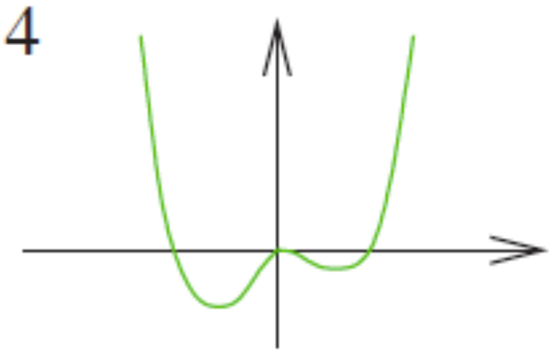
Welche Lösung?

für $T \sim T_c$ gilt $m \ll 1$

$$\frac{G_{\rm var}(T,h,m)}{N} \approx \frac{k_{\rm B}(T-T_c)}{2}\, m^2 + \frac{k_{\rm B}T}{12}\, m^4 - hm - k_{\rm B}T\,\ln 2$$

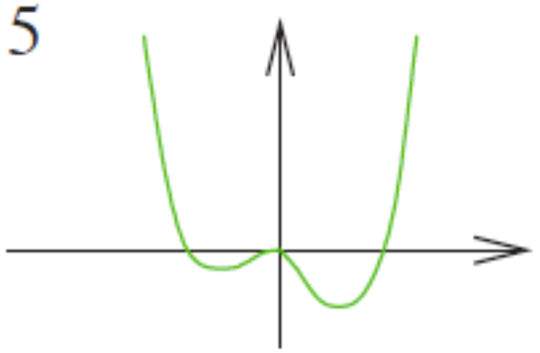
$h \neq 0$ mit externem Magnetfeld $T < T_c$

4

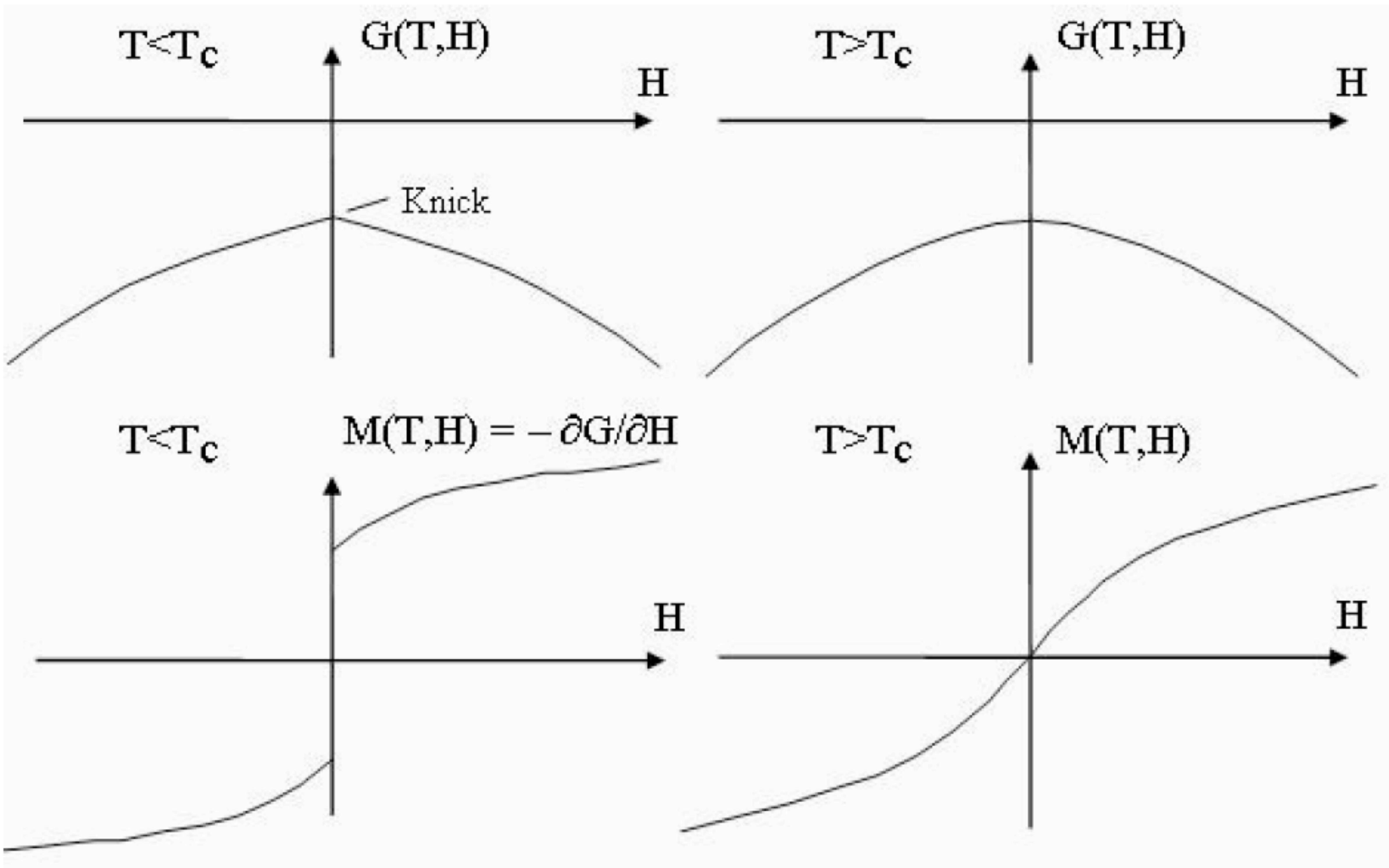


$h > 0$

5



$h < 0$



T<Tc
G(T,H)
H
Knick
T>Tc
G(T,H)
H
T<Tc
M(T,H) = –∂G/∂H
H
T>Tc
M(T,H)
H

Phasenübergang: Singuläres Verhalten

$$m = \tanh(\beta(h + J_0 z m)) \qquad k_\mathrm{B} T_c = z J_0$$

Umschreiben $$\beta h = \mathrm{Arctanh}(m) - \frac{T_c}{T} m$$

$$\mathrm{Arctanh}(x) = x + \frac{x^3}{3} + \dots$$

Entwickeln für $m \ll 1$ $$\beta h = \left(1 - \frac{T_c}{T}\right) m + \frac{m^3}{3} + \dots$$

$$\epsilon \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \approx \frac{T - T_c}{T}$$

Für $h = 0, \epsilon < 0$ $\quad m \propto (-\epsilon)^\beta \quad \beta = \frac{1}{2}$

Für $T = T_c$ $\quad m \propto h^{1/\delta} \quad \delta = 3$

kritische Exponenten

Phasenübergang: Singuläres Verhalten

Entwickeln für $m \ll 1$

$$\beta h = \left(1 - \frac{T_c}{T}\right) m + \frac{m^3}{3} + \ldots$$

$$\epsilon \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \approx \frac{T - T_c}{T}$$

Susceptibilität

$$\chi_T \propto \frac{\partial m}{\partial h} \propto \begin{cases} \frac{1}{\epsilon} \text{ für } T > T_c \\ \frac{1}{|\epsilon|} \text{ für } T < T_c \end{cases}$$