Moderne Theoretische Physik III (Einführung in die Theorie der Kondensierten Materie) SS 2024

Prof. Dr. A. D. Mirlin
Dr. Risto Ojajärvi and Dr. Paul Pöpperl

Blatt 3, Abgabe bis 03.06.2024
Besprechung 07.06.2024

---

1. Gekoppelte Ordnungsparameter

($5 + 10 + 15 + 10 + 10 = 40$ Punkte +10 Bonus-Punkte)

Betrachten Sie das Freie-Energiedichte-Funktional für ein System mit zwei gekoppelten Ordnungsparametern ϕ_1, ϕ_2:

$$f(\phi_1, \phi_2) = a(T - T_0)(\phi_1^2 + \phi_2^2) + b(\phi_1^4 + \phi_2^4) + \frac{c}{8}(\phi_1 + \phi_2)^4 + \frac{g}{2}(\phi_1 + \phi_2)^2 - h(\phi_1 + \phi_2), \quad (1)$$

mit Temperatur T, externem Feld h (z.B. Magnetfeld) und T_0, a, b, c, g konstant und > 0.

(a) Bestimmen Sie die Suszeptibilität:

$$\chi_1(T) = \lim_{h \to 0} \frac{\partial \phi_1}{\partial h} \quad (2)$$

in der ungeordneten Phase.

(b) *Hier und in den folgenden Teilaufgaben gilt $h = 0$.* Bestimmen Sie die kritische Temperatur T_c des Phasenübergangs.

(c) Finden Sie die lokalen Extrema des Funktionals. Bestimmen Sie das globale Minimum in Abhängigkeit der Parameter. Zeigen Sie, dass in der geordneten Phase bei $h = 0$ gilt, dass $\phi_1 = -\phi_2$.
Hinweis: Die Substitution $\phi_\pm = (1/2)(\phi_1 \pm \phi_2)$ kann nützlich sein.

(d) Berechnen Sie χ_1 in der geordneten Phase mit $\phi_1 = -\phi_2$.
Hinweis: Das geht ohne die vorangegangene Aufgabe zu lösen. Auch hier ist die Substitution $\phi_\pm = (1/2)(\phi_1 \pm \phi_2)$ nützlich.

(e) Bestimmen Sie die Entropie im thermodynamischen Limit. Diskutieren Sie, was für ein Term im phenomänologischen Ausdruck für die Freie-Energiedichte fehlt, damit das Resultat physikalisch korrekt ist.

2. Renormierungsgruppenrechnung für das 2D Ising-Modell

($10 + 10 + 10 + 10 + 5 + 15 = 60$ Punkte)

In der Vorlesung wurde das 2D-Ising Modell mit der Migdal-Kadanoff-Näherung renormiert. In dieser Aufgabe betrachten wir ein anderes Dezimierungsschema für das gleiche Modell.

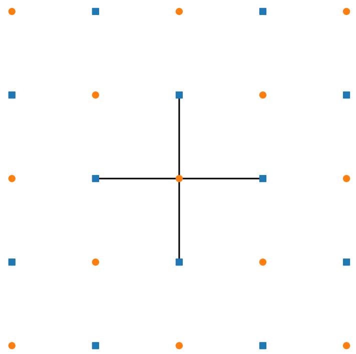
Der mit $\beta = (k_B T)^{-1}$ multiplizierte Hamilton-Operator des 2D Ising-Modells lautet

$$\tilde{H} = -\tilde{J}_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad \tilde{J}_1 := \beta J_1 \quad (3)$$

wobei $J_1 > 0$ die Kopplung zwischen direkt benachbarten Spins ist, und die Summation über $\langle i,j\rangle$ nächste Nachbarn auf einem unendlichen quadratischen 2D Gitter beschreibt, wobei jede nächste-Nachbar Kopplung nur einfach gezählt wird. σ_i ist der mit 2 multiplizierte Spin-1/2-Operator am Gitterplatz i. Wir betrachten die kanonische Zustandssumme

$$Z = \mathrm{tr}\Big(\mathrm{e}^{-\tilde{H}}\Big). \tag{4}$$

In der folgenden Skizze ist das Gitter in zwei Subgitter A (orangene Kreise) und B (blaue Quadrate) aufgeteilt. Die schwarzen Linien zeigen die Kopplungen zwischen dem zentralen Spin und seinen vier nächsten Nachbarn. **Subgitter A soll im ersten Schritt dezimiert werden.**



(a) Führen Sie die Summationen aus der Zustandssumme über die zu dezimierenden Spins (Subgitter A, orangene Kreise in obiger Skizze) aus.

(b) Erklären Sie ohne Rechnung, warum die Zustandssumme nach der Dezimierung auf die Form

$$Z = \sum_{\{\sigma_B\}} \mathrm{e}^{-\tilde{H}'(\{\sigma_B\})} \tag{5}$$

gebracht werden kann, wobei

$$\tilde{H}' = \tilde{H}_0 + \tilde{J}_1' \sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j + \tilde{J}_2' \sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle} \sigma_i\sigma_j + K \sum_{\{i,j,k,l\}\in\text{cells}} \sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l \tag{6}$$

und erklären Sie die Notation.

(c) Drücken Sie $\tilde{H}_0$, $\tilde{J}_1'$, $\tilde{J}_2'$ und K durch $\tilde{J}_1$ aus.

Hinweis: Betrachten Sie einen einzelnen Spin σ und dessen vier nächste Nachbarn $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$. Finden Sie den Beitrag dieses Subsystems zu $\tilde{H}'$ nach Summation über σ. Fordern Sie die gewünschte Form für diesen Beitrag, und bestimmen Sie die entsprechenden Koeffizienten, indem Sie alle möglichen Werte für die Spins einsetzen und die entsprechenden Gleichungen lösen. Mathematica ist hilfreich. Bestimmen Sie mit Hilfe von diesem Ergebnis $\tilde{H}_0$, $\tilde{J}_1'$, $\tilde{J}_2'$ und K. Achten Sie dabei auf kombinatorische Faktoren.

(d) Wie ändern sich die Ausdrücke für $\tilde{H}_0$, $\tilde{J}_1'$, $\tilde{J}_2'$ und K, wenn im ursprünglichen Hamilton-Operator auch eine Summe über **über**nächste Nachbarn mit Kopplung $\tilde{J}_2 \geq 0$ enthalten ist, unter der Annahme dass Sie die entstehende Wechselwirkung in Subgitter A vernachlässigen können?

Hinweis: Keine Rechnung nötig.

(e) Betrachten Sie nun die Ausdrücke $\tilde{H}_0(\tilde{J}_1, \tilde{J}_2)$, $\tilde{J}'_1(\tilde{J}_1, \tilde{J}_2)$, $\tilde{J}'_2(\tilde{J}_1, \tilde{J}_2)$ und $K(\tilde{J}_1, \tilde{J}_2)$ die Sie in der vorangegangenen Teilaufgabe gefunden haben. Vernachlässigen Sie den konstanten Term und den vier-Spin-Term. Dann ist die Zustandssumme (5) nach der Dezimierung wieder auf der gleichen Form wie vorher, wenn wir von Anfang an auch eine übernächste-Nachbarn-Kopplung annehmen; wobei aber die Hälfte der Spins dezimiert wurden. Jetzt können Sie die Ausdrücke $\tilde{J}'_1(\tilde{J}_1, \tilde{J}_2)$, $\tilde{J}'_2(\tilde{J}_1, \tilde{J}_2)$ als Rekursionsrelationen auffassen, die das wiederholte Anwenden der Dezimierungsprozedur beschreiben. Entwickeln Sie diese Rekursionsrelationen für $\tilde{J}_1 \ll 1$.

(f) Das Ergebnis für die Rekursionsrelationen aus der vorherigen Teilaufgabe lautet

$$\tilde{J}'_1 = 2\tilde{J}_1^2 + \tilde{J}_2 \tag{7}$$

$$\tilde{J}'_2 = \tilde{J}_1^2. \tag{8}$$

Welche drei Fixpunkte ergeben sich aus diesen Rekursionsrelationen? Fertigen Sie eine grobe, qualitative Skizze des Flussdiagramms im Parameterraum $\tilde{J}_1, \tilde{J}_2$ an und beschreiben Sie, wie Sie dazu vorgehen. Finden Sie den ungefähren kritischen Wert für $\tilde{J}_1$ bei $\tilde{J}_2 = 0$ (sie können das z.B. numerisch machen). Vergleichen Sie diesen mit dem exakten Ergebnis für das 2D Ising-Modell (3) (in der Vorlesung angegeben) und diskutieren Sie eventuelle Abweichungen. Gehen Sie hierbei kurz auf die Näherungen ein, die in der Aufgabe gemacht wurden.
Hinweis: Für einen Fixpunkt $(\bar{J}_1, \bar{J}_2)$ gilt $\tilde{J}'_1(\bar{J}_1, \bar{J}_2) = \bar{J}_1$, $\tilde{J}'_2(\bar{J}_1, \bar{J}_2) = \bar{J}_2$.

3. Bonus: Kritische Exponenten des Van-der-Waals-Gases
$(5 + 5 + 5 + 5 = 20$ Bonus-Punkte)

Die vdW-Gleichung kann man mit reduzierten Variablen schreiben als:

$$\left[\frac{P}{P_c} + 3\frac{V_c^2}{V^2}\right]\left(3\frac{V}{V_c} - 1\right) = 8\frac{T}{T_c}, \tag{9}$$

wobei P_c, V_c, T_c der kritische Druck bzw. Volumen und Temperatur sind, beim durch die vdW-Gleichung beschriebenen Phasenübergang (flüssig-gasförmig). In dieser Aufgabe bestimmen wir die kritischen Exponenten δ, γ für diesen Phasenübergang.

(a) Schreiben Sie die vdW-Gleichung mit Parametern, welche klein sind in der Nähe des Phasenüberganges:

$$\epsilon = T/T_c - 1, \tag{10}$$

$$\omega = V/V_c - 1, \tag{11}$$

$$\eta = P/P_c - 1. \tag{12}$$

Das heißt, schreiben Sie die Zustandsgleichung $\eta = \eta(\omega, \epsilon)$.

(b) Wir können nun eine Analogie sehen zwischen der Laundau-Theorie der Phasenübergänge und der vdW-Theorie. Hierbei ist ω analog zum Ordnungsparameter ϕ, und η analog zum konjugierten Feld h. Für das Ising-Modell gibt es im T, h-Parameterraum eine kritische Temperatur T_c, so dass für $T < T_c$ der Ordnungsparameter $\phi \neq 0$. Auch beim vdW-Modell gibt es im T, p-Parameterraum ein $T < T_c$, so dass es Ordnung geben kann (Phasenübergang flüssig-gasförmig), und bei $T > T_c$ gibt es eine sogenannte superkritische Phase (weder flüssig noch gasförmig).
Bestimmen Sie erst δ, den Exponenten der kritischen Isotherme $\epsilon = 0$.

(c) Bestimmen Sie nun den Exponenten γ, welcher zur isothermen Kompressibilität bei $\omega = 0$ gehört.

(d) Vergleichen Sie die kritischen Exponenten berechnet für die vdW-Gleichung, und die gegebenen Exponenten für die Landau-Theorie aus den Vorlesungen.