

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

Prof. Dr. A. D. Mirlin

Blatt 3, Abgabe bis 03.06.2024

Dr. Risto Ojajärvi and Dr. Paul Pöpperl

Besprechung 07.06.2024

**1. Gekoppelte Ordnungsparameter**

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

Betrachten Sie die Freie-Energiedichtefunktional für ein System mit zwei gekoppelten Ordnungsparameter  $\phi_1, \phi_2$ :

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

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

(a) Bestimmen Sie die Suszeptibilität:

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

in der ungeordneten Phase.

**Lösung:**

In der ungeordneten Phase und mit  $h \rightarrow 0$  gilt  $\phi_1, \phi_2 \rightarrow 0$ , so dass Terme von viertem Grad vernachlässigt werden können. Damit haben wir

$$f(\phi_1, \phi_2) \approx \frac{1}{2} (2a(T - T_0) (\phi_1^2 + \phi_2^2) + g(\phi_1 + \phi_2)^2 - 2h(\phi_1 + \phi_2)) \quad (3)$$

Am Extremum gilt

$$\frac{\partial f(\phi_1, \phi_2)}{\partial \phi_1} \stackrel{!}{=} 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial f(\phi_1, \phi_2)}{\partial \phi_2} \stackrel{!}{=} 0 \quad (5)$$

Und indem wir diese Gleichungen lösen finden wir

$$\phi_{1\min} = \phi_{2\min} = \frac{h}{2(g + a(T - T_0))} \quad (6)$$

Und schließlich aus der Definition der Suszeptibilität

$$\chi_1 = \frac{1}{2[a(T - T_0) + g]}. \quad (7)$$

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

**Lösung:** Da das Landau-Funktional nur gerade Terme enthält findet ein Phasenübergang zweiter Ordnung statt. In der Nähe des Phasenübergangs ist der Ordnungsparameter also klein, und wir können die Sattelpunktgleichungen linearisieren um die kritische Temperatur zu finden.

Die linearisierten Sattelpunktgleichungen lauten

$$\frac{\partial f(\phi_1, \phi_2)}{\partial \phi_1} = a(T - T_0)\phi_1 + g(\phi_1 + \phi_2) \stackrel{!}{=} 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial f(\phi_1, \phi_2)}{\partial \phi_2} = a(T - T_0)\phi_2 + g(\phi_1 + \phi_2) \stackrel{!}{=} 0 \quad (9)$$

Wenn wir diese Gleichungen voneinander abziehen finden wir ausserdem

$$a(T - T_0)(\phi_1 - \phi_2) \stackrel{!}{=} 0 \quad (10)$$

Also gibt es nichttriviale Lösungen ( $\phi_1 \neq 0 \neq \phi_2$ ) nur wenn

$$T = T_0. \quad (11)$$

Damit ist  $T_c = T_0$ .

Insbesondere liegt die kritische Temperatur über der Temperatur bei der  $\chi_1$  divergiert.

- (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: Sie können die Substitution  $\phi_{\pm} = (1/2)(\phi_1 \pm \phi_2)$  benutzen.*

**Lösung:** Nun gilt nicht mehr, dass  $\phi_1, \phi_2 \rightarrow 0$ . Analog zur Teil a) bekommen wir:

$$2[a(T - T_0) + g]\phi_+ + 12b\phi_-^2\phi_+ + 4(b + c)\phi_+^3 = h = 0 \quad (12)$$

$$a(T - T_0)\phi_- + 6b\phi_+^2\phi_- + 2b\phi_-^3 = 0. \quad (13)$$

Das Funktional kann extremal werden für die folgenden Kombinationen von  $\phi_+$  und  $\phi_-$ :

1.  $\phi_+ = \phi_- = 0$

2.  $\phi_+ = 0, \phi_-^2 = \frac{a(T_0 - T)}{2b}$  (für diesen Fall muss  $T < T_0$  gelten)

3.  $\phi_- = 0, \phi_+^2 = \frac{a(T_0 - T) - g}{2(c + b)}$  (für diesen Fall muss  $T < T_0 - \frac{g}{a}$  gelten).

4.  $\phi_- \neq 0$  und  $\phi_+ \neq 0$  und  $\phi_-^2 = \frac{a(T_0 - T) - 6b\phi_+^2}{2b}$  und  $\phi_+^2 = \frac{a(T_0 - T) - g - 6b\phi_-^2}{2(c + b)}$ ,

also

$$\phi_-^2 = -\frac{a(2b - c)(T - T_0) + 3bg}{16b^2 - 2bc} \quad (14)$$

$$\phi_+^2 = \frac{2a(T_0 - T) + g}{16b - 2c} \quad (15)$$

und  $\phi_+^2 > 0$  sowie  $\phi_-^2 > 0$ .

Wir bestimmen das globale Minimum, indem wir alle Fälle in das freie-Energie-Funktional einsetzen:

$$f_1 = 0 \quad (16)$$

$$f_2 = -\frac{(a(T_0 - T))^2}{2b} \quad (17)$$

$$f_3 = -\frac{(g + a(T - T_0))^2}{2(c + b)} \quad (18)$$

$$f_4 = \frac{b(-4a^2(T - T_0)^2 + 4ag(T - T_0) + g^2) + a^2c(T - T_0)^2}{2b(8b - c)} \quad (19)$$

Offenbar ist  $f_1$  in der geordneten Phase nie das globale Minimum, da  $f_2$  negativ ist. Als nächstes untersuchen wir, ob  $f_3 < f_2$  sein kann. Hierbei können wir die Nenner vernachlässigen, weil  $c + b > b$ . Vergleichen von die Zähler gibt dann:

$$f_3 < f_2 \quad (20)$$

$$\Leftrightarrow \frac{(g + a(T - T_0))^2}{2(c + b)} > \frac{(a(T_0 - T))^2}{2b} \quad (21)$$

$$\Rightarrow |g + a(T - T_0)| > |a(T_0 - T)| \quad (22)$$

$$a(T_0 - T) - g > a(T_0 - T) \quad (23)$$

Das führt zum Widerspruch.

Jetzt müssen wir noch  $f_4$  mit  $f_2$  vergleichen:

$$f_4 - f_2 = \frac{(g + 2a(T_0 - T))^2}{2(8b - c)} \quad (24)$$

Wenn  $f_4$  das globale Minimum ist, dann muss dieses Ergebnis kleiner als 0 sein. Das erfordert offenbar  $8b - c < 0$ . Dass das Minimum bei realen  $\phi_+$ ,  $\phi_-$  angenommen wird, brauchen wir aber auch

$$\phi_-^2 > 0 \quad (25)$$

$$\Leftrightarrow -\frac{a(2b - c)(T - T_0) + 3bg}{16b^2 - 2bc} > 0 \quad (26)$$

$$\Leftrightarrow a(2b - c)(T - T_0) + 3bg > 0 \quad (27)$$

$$\Leftrightarrow Ta(2b - c) > T_0a(2b - g) - 3bg \quad (28)$$

$$\Leftrightarrow T < T_0 + \frac{3bg}{a(c - 2b)} \quad (29)$$

$$\Rightarrow T < T_0 + \frac{3bg}{6ab} \quad (30)$$

$$= T_0 + \frac{g}{2a} \quad (31)$$

Und

$$\phi_+^2 > 0 \quad (32)$$

$$\Leftrightarrow 2a(T_0 - T) + g < 0 \quad (33)$$

$$\Leftrightarrow T > T_0 + \frac{g}{2a}. \quad (34)$$

Diese beiden Bedingungen sind widersprüchlich. Also ist  $f_2$  immer das globale Minimum in der geordneten Phase. Da  $f_2$  zu  $\phi_+ = 0$  korrespondiert, folgt  $\phi_1 = -\phi_2$ .

(d) Berechnen Sie  $\chi_1$  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.*

**Lösung:** Im vorangegangenen Teil haben wir gesehen, dass:

$$2[a(T - T_0) + g]\phi_+ + 12b\phi_-^2\phi_+ + 4(b + c)\phi_+^3 = h \quad (35)$$

$$a(T - T_0)\phi_- + 6b\phi_+^2\phi_- + 2b\phi_-^3 = 0. \quad (36)$$

Wir leiten beide Gleichungen nach  $h$  ab und setzen dann  $h = 0$ :

$$2[a(T - T_0) + g]\chi_+ + 12b\phi_-^2\chi_+ + 12(b + c)\phi_+^2\chi_+ + 24b\phi_- \phi_+ \chi_- = 1 \quad (37)$$

$$a(T - T_0)\chi_- + 6b(\phi_+^2 + \phi_-^2)\chi_- + 12b\phi_+ \phi_- \chi_+ = 0. \quad (38)$$

Mit  $\phi_1 = -\phi_2$  führt das zu:

$$\chi_+ = \frac{1}{2a(T - T_0) + 2g + 12b\phi_-^2}, \quad \chi_- = 0. \quad (39)$$

Mit (36) bei  $\phi_+ = 0$  bekommen wir:

$$\phi_-^2 = -\frac{a(T - T_0)}{2b}, \quad (40)$$

und damit:

$$\chi_1 = \chi_2 = \frac{1}{4a(T_0 - T) + 2g}. \quad (41)$$

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

**Lösung:**

$$S = - \left( \frac{\partial F(\phi_-(T), T)}{\partial T} \right)_{V, N}. \quad (42)$$

Mit der Kettenregel:

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial \phi_-} \right)_{V, N, T} \frac{\partial \phi_-}{\partial T} - \left( \frac{\partial F(\phi_-, T)}{\partial T} \right)_{V, N, \phi_-}. \quad (43)$$

Weil  $\frac{\partial F}{\partial \phi_-} = 0$  vereinfacht sich das zu:

$$S = - \left( \frac{\partial F(\phi_-, T)}{\partial T} \right)_{V, N, \phi_-}. \quad (44)$$

Auch gilt, dass:

$$Z = \int d\phi_- e^{-\beta \mathcal{F}[\phi_-]}, \quad (45)$$

wobei  $\mathcal{F} = V f$ , weil  $\phi_-$  unabhängig ist von den räumlichen Koordinaten.

Im thermodynamischen Limit benutzen wir die Sattelpunktnäherung (siehe Vorlesungen), so dass  $\mathcal{F}[\phi_-]|_{\phi_{\min}} = F$  (da  $h = 0$ ). Damit bekommen wir:

$$S = V \frac{a^2(T - T_0)}{b}, \quad T < T_c, \quad (46)$$

und  $S = 0$  für  $T > T_c$ .

Die Entropie ist negativ für  $T < T_c$ . Das bedeutet, dass die Freie-Energiedichte noch einen Beitrag haben muss, welcher unabhängig ist von  $\phi_1, \phi_2$  und explizit abhängt von der Temperatur.

## 2. Renormierungsgruppenrechnung für das 2D Ising-Modell

(10 + 10 + 10 + 10 + 10 + 10 = 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.

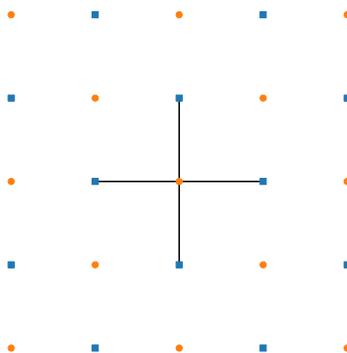
Der mit  $\beta = (k_B T)^{-1}$  multiplizierte Hamilton-Operator des 2D Ising-Modells lautet

$$\tilde{H} = -\tilde{J}_1 \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad \tilde{J}_1 := \beta J_1 \quad (47)$$

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.  $\sigma_i$  ist der mit 2 multiplizierte Spin-1/2-Operator am Gitterplatz  $i$ . Wir betrachten die kanonische Zustandssumme

$$Z = \text{tr} \left( e^{-\tilde{H}} \right). \quad (48)$$

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.

**Lösung:** Wir werten die Spur über die Spins in der Produkt-Basis als Summen aus:

$$Z = \sum_{\{\sigma \in \pm 1\}} e^{-\tilde{H}(\{\sigma\})}. \quad (49)$$

Um klar zu machen über welche Spins summiert werden soll schreiben wir die Hamilton-Funktion um:

$$\tilde{H} = -\tilde{J}_1 \sum_{(i,j) \in A} \sigma_{(A,i,j)} (\sigma_{(B,i+1,j)} + \sigma_{(B,i-1,j)} + \sigma_{(B,i,j+1)} + \sigma_{(B,i,j-1)}) \quad (50)$$

Hierbei verwenden wir zwei-komponentige Indizes für jeden Spin, um den Platz auf dem 2D Gitter zu notieren. Ausserdem führen wir Subgitterindizes  $A$  und  $B$  mit, dass klar ist welcher Spin zu welchem Subgitter gehört. Man kann sich klarmachen, dass Gleichung (50) tatsächlich jede nächste-Nachbar-Kopplung genau einmal zählt. Nächste Nachbarn von Spins im Gitter  $A$  sind immer Teil von Gitter  $B$ .

Für jeden zu dezimierenden Spin (auf Subgitter  $A$ ) müssen wir jetzt diese Summe ausführen:

$$\sum_{\sigma=\pm 1} e^{\tilde{J}_1 \sigma (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)} = 2 \cosh \left[ \tilde{J}_1 (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) \right] \quad (51)$$

Also erhalten wir für die Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{\sigma_B\}} \sum_{\{\sigma_A\}} \prod_{(i,j) \in A} e^{\tilde{J}_1 \sigma_{(A,i,j)} (\sigma_{(B,i+1,j)} + \sigma_{(B,i-1,j)} + \sigma_{(B,i,j+1)} + \sigma_{(B,i,j-1)})} \quad (52)$$

$$= \sum_{\{\sigma_B\}} \prod_{(i,j) \in A} \sum_{\sigma} e^{\tilde{J}_1 \sigma (\sigma_{(B,i+1,j)} + \sigma_{(B,i-1,j)} + \sigma_{(B,i,j+1)} + \sigma_{(B,i,j-1)})} \quad (53)$$

$$= \sum_{\{\sigma_B\}} e^{\sum_{(i,j) \in A} \log \{ 2 \cosh [\tilde{J}_1 (\sigma_{(B,i+1,j)} + \sigma_{(B,i-1,j)} + \sigma_{(B,i,j+1)} + \sigma_{(B,i,j-1)})] \}} \quad (54)$$

Im letzten Schritt hat die Dezimierung stattgefunden, da alle Freiheitsgrade von Gitter  $A$  durch Summation aus der Zustandssumme verschwunden sind.

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

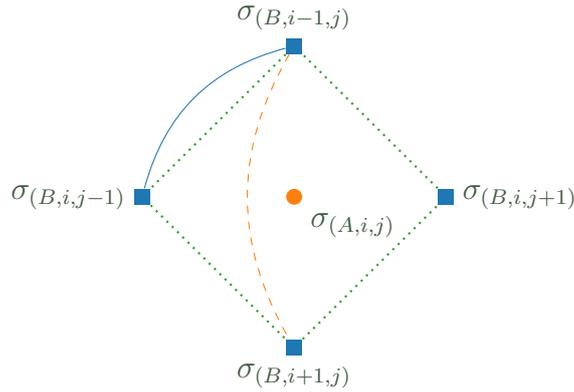
$$Z = \sum_{\{\sigma_B\}} e^{-\tilde{H}'(\{\sigma_B\})} \quad (55)$$

gebracht werden kann, wobei

$$\tilde{H}' = \tilde{H}_0 - \tilde{J}'_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \tilde{J}'_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j + K \sum_{\{i,j,k,l\} \in \text{cells}} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \quad (56)$$

und erklären Sie die Notation.

**Lösung:** Wenn die Spur über Spin  $(A, i, j)$  ausgeführt wird, kann man das als effektive Wechselwirkungen zwischen den Spins  $(B, i + 1, j)$ ,  $(B, i - 1, j)$ ,  $(B, i, j + 1)$ ,  $(B, i, j - 1)$  verstehen. Neben einem konstanten Term sind drei verschiedene effektive Kopplungen im Subgitter  $B$  möglich:



- Kopplung zwischen im Subgitter benachbarten Spins (Beispiel: blaue Linie)
- Kopplung zwischen gegenüberliegenden Spins (übernächsten Nachbarn im Subgitter) (Beispiel: gestrichelte orangefarbene Linie)
- Vier-Spin-Kopplung zwischen allen vier umliegenden Spins (gepunktete grüne Linie).

In Gleichung (56) ist die Kopplung zwischen übernächsten Nachbarn als  $\sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle}$  notiert,

und “cells” steht für alle möglichen kleinsten Quadrate aus vier Spins (gepunktete grüne Linie in der Skizze). Da alle Spins aus Gitter  $A$  “aussummiert” wurden treten in  $\tilde{H}'$  und in der Summe nur noch Spins von Subgitter  $B$  auf. (Dementsprechend beziehen sich die Nachbarschaftsverhältnisse auch auf das neue Gitter.)

(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  $\sigma$  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  $\sigma$ . 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.*

**Lösung:** Wir gehen vor wie im Hinweis beschrieben. Der Beitrag nach Summation ist

$$\log\{2 \cosh[\tilde{J}_1(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)]\} \quad (57)$$

und die effektive Kopplung zwischen  $\sigma_i$ ,  $i \in \{1, 2, 3, 4\}$  ist unseren Überlegungen aus der vorangegangenen Teilaufgabe zufolge von der Form

$$(c_1 + c_2(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1) + c_2(\sigma_2\sigma_4 + \sigma_1\sigma_3) + c_3\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4). \quad (58)$$

Hierbei haben wir für die Terme zwischen Nachbarn und gegenüberliegenden Spins den gleichen Vorfaktor  $c_2$  gewählt, da Ausdruck (57) nicht zwischen  $\sigma_i$ ,  $i \in \{1, 2, 3, 4\}$  unterscheidet und diese daher im Ergebnis gleich vorkommen müssen.

Durch Vergleich finden wir

$$c_1 = \frac{1}{8} \left[ 4 \log \left( \cosh \left( 2\tilde{J}_1 \right) \right) + \log \left( \cosh \left( 4\tilde{J}_1 \right) \right) \right] + \log(2) \quad (59)$$

$$c_2 = \frac{1}{8} \log \left[ \cosh \left( 4\tilde{J}_1 \right) \right] \quad (60)$$

$$c_3 = \frac{1}{8} \left[ -4 \log \left( \cosh \left( 2\tilde{J}_1 \right) \right) + \log \left( \cosh \left( 4\tilde{J}_1 \right) \right) \right]. \quad (61)$$

Sie können überprüfen dass wie im Hinweis beschrieben die Ausdrücke (57) und (58) mit diesen  $c_1, c_2, c_3$  für alle Werte  $\{\sigma_i\} \in \{-1, 1\}$  gleich sind (wir haben also nur eine Umformung durchgeführt).

Wenn wir den Beitrag jeden Spins  $\sigma \in A$  berücksichtigen, finden wir

$$\tilde{H}_0 = -Nc_1 \quad (62)$$

$$\tilde{J}'_1 = 2c_2 \quad (63)$$

$$\tilde{J}'_2 = c_2 \quad (64)$$

$$K = -c_3. \quad (65)$$

Hierbei ist  $N$  die (unendliche) Gesamtzahl der Spins, die aber nur einen konstanten Faktor liefert, der in thermodynamischen Größen nichts ändert. Der Faktor 2 kommt zustande, da die nächste-Nachbar Kopplung für jedes in  $B$  benachbarte Spin-paar von jeweils zwei verschiedenen  $\sigma \in A$  erzeugt wird.

Auf dem Übungsblatt waren die Kopplungen  $\tilde{J}'_1$  und  $\tilde{J}'_2$  in (56) ohne negatives Vorzeichen angegeben. Das sollte nicht so sein, da die Zustandssumme dann nach der Dezimierung und Umformung auf der gleichen Form ist wie vorher (vergleiche Gleichung (47)). Wir könnten stattdessen negative Vorzeichen in Gleichungen (63) und (64) einfügen, aber dann würden wir in e) keine sinnvollen Rekursionsrelationen erhalten.

- (d) Wie ändern sich die Ausdrücke, 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.*

**Lösung:** Eine Kopplung zwischen übernächsten Nachbarn koppelt Spins jeweils innerhalb der Subgitter  $A$  und  $B$ . Laut Aufgabenstellung vernachlässigen wir die Kopplung innerhalb von Subgitter  $A$ . Die Kopplung innerhalb von Subgitter  $B$  übersetzt sich genau zu einer nächste-Nachbar-Wechselwirkung, nachdem Subgitter  $A$  "aussummiert" wurde. Daher ist  $\tilde{J}_2$  ein Beitrag zu  $\tilde{J}'_1$  und wir modifizieren

$$\tilde{J}'_1 \rightarrow \tilde{J}'_1 + \tilde{J}_2. \quad (66)$$

- (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 (55) 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  $\tilde{J}_1 \ll 1$ .

**Lösung:** Wie in der Aufgabenstellung angegeben vernachlässigen wir den konstanten Term  $\tilde{H}_0$  (dieser hat ohnehin keinen Einfluss auf thermodynamische Größen), sowie den vier-Spin-Term  $K$ .

Die verbleibenden Ausdrücke lauten

$$\tilde{J}'_1 = \frac{1}{4} \log \left[ \cosh(4\tilde{J}_1) \right] + \tilde{J}_2 \quad (67)$$

$$\tilde{J}'_2 = \frac{1}{8} \log \left[ \cosh(4\tilde{J}_1) \right]. \quad (68)$$

Wir entwickeln beide Ausdrücke zur jeweils führenden Ordnung in  $\tilde{J}_1$ :

$$\tilde{J}'_1 \approx 2\tilde{J}_1^2 + \tilde{J}_2 \quad (69)$$

$$\tilde{J}'_2 \approx \tilde{J}_1^2. \quad (70)$$

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

$$\tilde{J}'_1 = 2\tilde{J}_1^2 + \tilde{J}_2 \quad (71)$$

$$\tilde{J}'_2 = \tilde{J}_1^2. \quad (72)$$

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 (47) (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  $\tilde{J}'_1(\bar{J}_1, \bar{J}_2) = \bar{J}_1$ ,  $\tilde{J}'_2(\bar{J}_1, \bar{J}_2) = \bar{J}_2$ .

**Lösung:** Offenbar sind die Punkte  $(0, 0)$  und  $(\infty, \infty)$  invariant unter Anwendung der Relationen. Beide Punkte sind stabil: Wenn wir jeweils Zahlen  $\ll 1$  einsetzen führt die Rekursion zu 0, bei großen Zahlen zu unendlich. Der Fixpunkt bei 0 korrespondiert zu freien Spins, also einer ungeordneten Phase. Große Kopplungen favorisieren hingegen Ordnung, da es nach Iteration immer eine hierarchie  $\tilde{J}_1 > \tilde{J}_2$  gibt.

Indem wir das Gleichungssystem

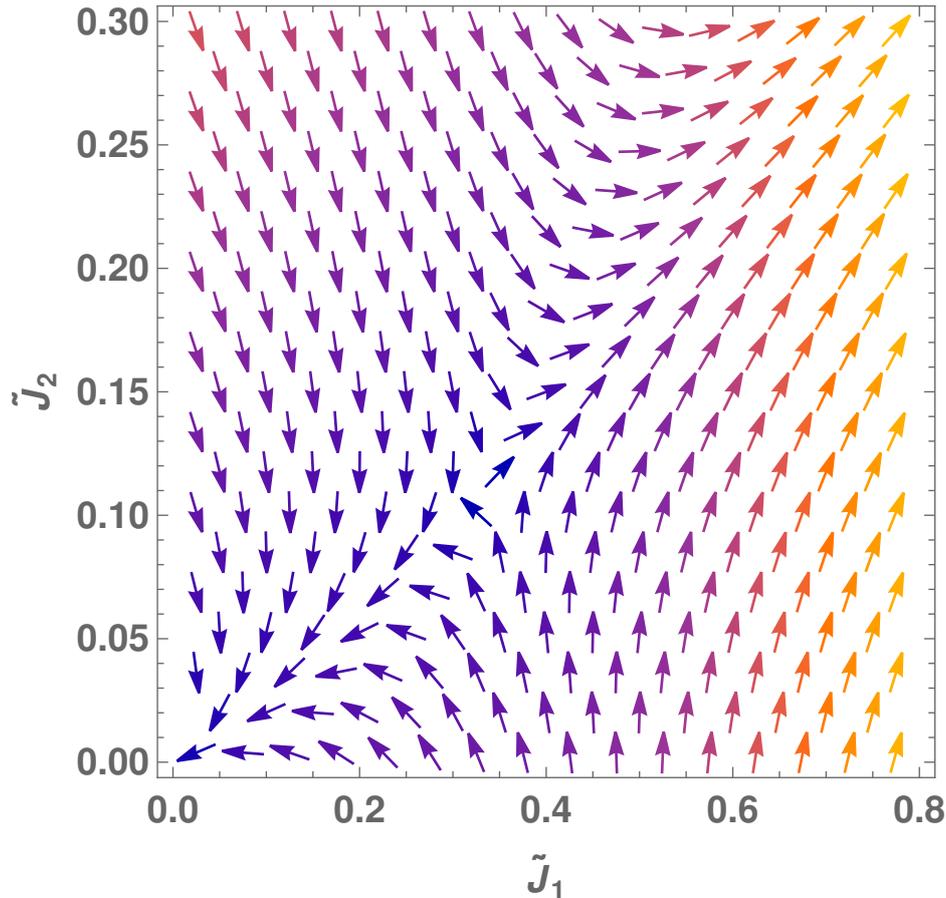
$$\bar{J}_1 = 2\bar{J}_1^2 + \bar{J}_2 \quad (73)$$

$$\bar{J}_2 = \bar{J}_1^2 \quad (74)$$

lösen, finden wir einen dritten Fixpunkt

$$\bar{J}_1^* = \frac{1}{3}, \quad \bar{J}_2^* = \frac{1}{9}. \quad (75)$$

Um eine Skizze des Flusses anzufertigen, können wir von Hand einige Punkte in die Rekursion einsetzen und deren Fluss verfolgen und zeichnen. Alternativ ein Vektorplot von  $(2\tilde{J}_1^2 + \tilde{J}_2 - \tilde{J}_1, \tilde{J}_1^2 - \tilde{J}_2)$  in Mathematica:



Man kann gut alle drei Fixpunkte erkennen. (Die Farben repräsentieren die Normen der eingezeichneten Vektoren, wobei hell länger und dunkel kürzer bedeutet.)

Numerisch können wir den kritischen Wert für  $\tilde{J}_1$  bei  $\tilde{J}_2 = 0$  bestimmen, indem wir die Rekursionsrelationen implementieren und wiederholt auf verschiedene gegebene Startpunkte anwenden, um jeweils zu entscheiden zu welchem Fixpunkt die Relation führt. So finden wir

$$\tilde{J}_1^{\text{crit}} \approx 0.39. \quad (76)$$

Im Vergleich dazu war in der Vorlesung der korrekte Wert  $\tilde{J}_1^{\text{crit}} \approx 0.44$  angegeben. Unser Ergebnis weicht also vom exakten Wert ab. Das war auch zu erwarten, da wir verschiedene Näherungen gemacht haben. Abgesehen davon dass wir die Rekursionsrelationen genähert haben, wurden auch alle höheren Spin-Wechselwirkungen (angefangen bei der vier-Spin-Wechselwirkung) vernachlässigt. Das ist im besten Fall für  $\tilde{J}_1, \tilde{J}_2 \ll 1$  gerechtfertigt, was aber nicht für den gegebenen kritischen Wert erfüllt ist.

### 3. Bonus: Kritische Exponenten des vdW-Gases (5 + 5 + 5 + 5 = 20 Bonus-Punkte)

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

$$\left[ \frac{P}{P_c} + 3 \frac{V_c^2}{V^2} \right] \left( 3 \frac{V}{V_c} - 1 \right) = 8 \frac{T}{T_c}, \quad (77)$$

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  $\alpha, \beta, \delta, \gamma$  für diesen Phasenübergang.

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

$$\epsilon = T/T_c - 1, \quad (78)$$

$$\omega = V/V_c - 1, \quad (79)$$

$$\eta = P/P_c - 1. \quad (80)$$

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

**Lösung:**

Ein wenig Algebra führt zu:

$$\left[ (1 + \eta) + \frac{3}{(1 + \omega)^2} \right] (3\omega + 2) = 8(1 + \epsilon), \quad (81)$$

$$\eta = \frac{8\epsilon + 16\epsilon\omega + 8\epsilon\omega^2 - 3\omega^3}{2 + 7\omega + 8\omega^2 + 3\omega^3}. \quad (82)$$

- (b) Wir können nun eine Analogie sehen zwischen der Landau-Theorie der Phasenübergänge und der vdW-Theorie. Hierbei ist  $\omega$  analog zum Ordnungsparameter  $\phi$ , und  $\eta$  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  $\delta$ , den Exponenten der kritischen Isotherme  $\epsilon = 0$ .

**Lösung:** Wir bekommen:

$$\eta(\omega, \epsilon = 0) = \frac{-3\omega^3}{2 + 7\omega + 8\omega^2 + 3\omega^3} \approx -\frac{3}{2}\omega^3 + \mathcal{O}(\omega^4). \quad (83)$$

Deshalb ist  $\delta = 3$ .

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

**Lösung:** Die isotherme Kompressibilität ist:

$$\kappa = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P} \quad (84)$$

$$= -\frac{1}{V_c(\omega + 1)} V_c \frac{\partial \omega + 1}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial P} \quad (85)$$

$$= -\frac{1}{\omega + 1} \frac{1}{P_c} \frac{\partial \omega}{\partial \eta} \quad (86)$$

$$= -\frac{1}{\omega + 1} \frac{1}{P_c} \left( -\frac{1}{6\epsilon} \right). \quad (87)$$

Also, bei  $\omega = 0$

$$\kappa \propto \epsilon^{-1} =: \epsilon^{-\gamma}. \quad (88)$$

Es folgt  $\gamma = 1$ .

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

**Lösung:** Alle Exponenten sind genau gleich den in den Vorlesungen gegebenen Exponenten. Das war zu erwarten, weil die vdW-Theorie eine Molekularfeldtheorie ist, wie auch die Landau-Theorie.