KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE | INSTITUT FÜR THEORIE DER KONDENSIERTEN MATERIE

Übungen zu Moderne Theoretischen Physik III SS 16

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny, Dr. P. Schad

Blatt 14
Besprechung: Freitag, 22.07.2016

---

1. Landau-Funktional des Ising-Modells

($14 + 12 + 12 + 12 = 50$ Punkte, schriftlich)

In dieser Aufgabe soll gezeigt werden, dass ein Ising-Modell im Limes großer Wellenlängen (kleine $\boldsymbol{k}$) durch ein Landau-Funktional beschrieben werden kann. Betrachten Sie ein Ising-Modell aus N Spins ($\sigma_i = \pm 1$) auf einem 3-dimensionalen Gitter mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung (J_{ij}):

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \tag{1}$$

Die Wechselwirkungskonstanten J_{ij} können hier als Matrix $\hat{J}$ aufgefasst werden, die Matrix $\hat{J}$ sei invertierbar. (In Matrixschreibweise mit Vektoren $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \ldots, \sigma_N)$ kann man den Wechselwirkungsterm schreiben als $-\boldsymbol{\sigma} \hat{J} \boldsymbol{\sigma}$.)

(a) Führen Sie die Summen über $\sigma_i = \pm 1$ in der Zustandssumme aus. Entkoppeln Sie dazu die Spin-Spin-Wechselwirkungsterme mit der Hubbard-Stratonovich-Transformation (eine Verallgemeinerung der Transformation in Aufg. 1 auf Blatt 13)

$$e^{\beta \sum_{i,j} \sigma_i J_{ij} \sigma_j} = \frac{1}{\sqrt{(4\pi\beta)^N \det \hat{J}}} \int \prod_i dx_i e^{-\frac{1}{4\beta} \sum_{i,j} x_i \left(\hat{J}^{-1}\right)_{ij} x_j + \sum_i x_i \sigma_i} . \tag{2}$$

Ersetzen Sie dann die Variablen x_i in der Zustandssume mit neuen Variablen φ_i,

$$\varphi_i = \frac{1}{\beta\sqrt{2}} \sum_j \left(\hat{J}^{-1}\right)_{ij} x_j \ , \tag{3}$$

entwickeln Sie den Exponenten in der Form $\log(\cosh z) \approx \frac{z^2}{2} - \frac{z^4}{12}$ und fassen Sie die quadratischen Terme im Exponenten zusammen.

(b) Transformieren Sie mit

$$\varphi_i = \varphi(\boldsymbol{r}_i) = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \varphi_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \ , \tag{4}$$

analog $J_{ij} = J(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|)$, in den Fourierraum. Die Summe $\sum_{\boldsymbol{k}}$ läuft über alle N möglichen Werte von $\boldsymbol{k}$. Wie sieht das Landau-Funktional $F[\varphi_{\boldsymbol{k}}]$ in

$$Z \propto \sqrt{\beta^N} \int \prod_{\boldsymbol{k}} d\varphi_{\boldsymbol{k}} e^{-\beta F[\varphi_{\boldsymbol{k}}]} \tag{5}$$

aus?

(c) Betrachten Sie den Limes großer Wellenlängen, $k_x, k_y, k_z \ll 1/\bar{a}$: Vereinfachen Sie $J_{\boldsymbol{k}}$ zu (Gitterkonstante $\bar{a}$)

$$J_{\boldsymbol{k}} \approx 2J\left(d - \bar{a}^2\boldsymbol{k}^2\right) = J_0\left(1 - \frac{\bar{a}^2}{d}\boldsymbol{k}^2\right) \quad . \tag{6}$$

Benutzen Sie dazu, dass die J_{ij} nur für Nächste-Nachbar-Paare von Null verschieden sind. Auch den Wechselwirkungsterm können Sie mit (6) vereinfachen, nehmen Sie dabei nur den konstanten ($\boldsymbol{k}$-unabhängig) Beitrag mit.

(d) Im Limes kleiner $|\boldsymbol{k}| \ll \bar{a}$ ist es sinnvoll, die Summe über $\boldsymbol{k}$ in $F[\varphi_{\boldsymbol{k}}]$ auf Integralform zu bringen. Benutzen Sie die kontinuierliche Fourier-Transformation $\varphi_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{V}\int d^3r\varphi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ um wieder in den Ortsraum zu transformieren und zeigen Sie, dass

$$F[\varphi(\boldsymbol{r})] = \frac{g_0}{2}\int d^3r\left(a\varphi^2(\boldsymbol{r}) + \xi_0^2(\nabla\varphi(\boldsymbol{r}))^2 + \frac{b}{2}\varphi^4(\boldsymbol{r})\right) \quad , \tag{7}$$

wobei $a = \frac{T-T_c}{T}$ sein soll. Geben Sie g_0, T_c, ξ_0 und b an.

Damit haben Sie aus dem Ising-Modell (1) ein Landau-Funktional hergeleitet. Bei $T = T_c$ wechselt a das Vorzeichen und es findet ein Phasenübergang statt.

2. Ginzburg-Kriterium (10 + 10 + 10 + 10 + 10 = 50 Punkte, mündlich)

Nach der Landau-Theorie kann man die Zustandssumme in der Form

$$Z = \int D[\varphi]e^{-\beta F[\varphi]} \tag{8}$$

schreiben, $F[\varphi]$ ist dabei das Landau-Funktional (der Vorfaktor, vgl. (5), ist im Integralmaß $D[\varphi]$ enthalten). Das Integral in diesem Ausdruck ist ein Pfadintegral, das alle möglichen Konfigurationen der Variablen φ berücksichtigt. Wie in der Vorlesung diskutiert wird in der Molekularfeldtheorie (mean field theory) das Integral durch den größten Beitrag am Sattelpunkt $F_0 = F[\varphi_0]$ von F genähert. Um diese Näherung zu überprüfen muss man Fluktuationen $\delta F[\varphi]$ um den Sattelpunkt F_0 betrachten.

In der Vorlesung wurde gezeigt, dass man mit einem Landau-Funktional der Form (7),

$$F[\varphi] = \frac{g_0}{2}\int d^dr\left(a\varphi^2(\boldsymbol{r}) + \xi_0^2(\nabla\varphi(\boldsymbol{r}))^2 + \frac{b}{2}\varphi^4(\boldsymbol{r})\right) \quad . \tag{9}$$

für die freie Enthalpie das folgende Ergebnis erhält:

$$G(T, H = 0) = F_0 + \delta G \qquad \text{mit} \tag{10}$$

$$\delta G(T, H = 0) = \frac{Vk_BT}{2}\int\frac{d^dk}{(2\pi)^d}\log\left(A + \xi_0^2\boldsymbol{k}^2\right) + k_BT(konst.) \tag{11}$$

mit $A = a + 3b\varphi_0^2$ und $a = \frac{T-T_c}{T}$. Die Dimension d sei hier beliebig. Der Teil δG berücksichtigt den Beitrag der Fluktuationen von φ um φ_0.

(a) Entwickeln Sie $F[\varphi]$ in $\varphi = \varphi_0 + \delta\varphi$ und geben Sie zunächst F_0 und $\varphi_0(T)$ an (Wiederholung aus der Vorlesung). Bestimmen Sie aus F_0 die Wärmekapazität c_{mf} der Molekularfeldtheorie (bei konstantem V).

(b) Zeigen Sie, dass die quadratischen φ-Terme in (9) die Korrektur δG nach (11) generieren. Benutzen Sie dazu die d-dimensionale Fourier-Transformation

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \varphi_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \ . \tag{12}$$

Beachten Sie den Faktor $\sqrt{\beta^N}$ im Integralmaß $D[\varphi]$, vgl.(5), im Unterschied zur Vorlesung.

(c) Betrachten Sie jetzt den Beitrag δG der Fluktuationen, gegeben durch (11). Berechnen Sie den Beitrag c_{fluc} zur Wärmekapazität, zunächst ohne die $\boldsymbol{k}$-Integrale auszuwerten.

Schreiben Sie die Integrale in c_{fluc} in der Form

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{\left(\xi^{-2} + \boldsymbol{k}^2\right)^s} \tag{13}$$

Wie verhält sich die Korrelationslänge ξ in der Nähe des Phasenübergangs $T \sim T_c$?

(d) Welches der beiden Integrale in c_{fluc} liefert für kleine $\boldsymbol{k}$ den größeren Beitrag? Berechnen Sie das Integral, vernachlässigen Sie dabei die Beiträge aus dem Bereich $k \to \infty$. Zeigen Sie, dass der Beitrag der Fluktuationen zur Wärmekapazität (für $d < 4$) die Form

$$c_{fluc} = konst. \frac{T^2 \, \xi^{4-d}}{4-d} \tag{14}$$

hat. Was ist hier die Konstante?

(e) Skizzieren Sie die beiden Beiträge $c_{mf}(T)$ und $c_{fluc}(T)$ zur Wärmekapazität in der Umgebung von T_c für $d = 3$. Vergleichen Sie die Beiträge: Für welche Werte der Dimension d und der Korrelationslänge ξ ist die Molekularfeldtheorie gültig? Konstanten der Größenordnung 1 können Sie dabei vernachlässigen. Die Bedingung für ξ bzw. T ist das Ginzburg-Kriterium.

Die Klausur zur Vorlesung findet am Dienstag, dem 26.07.2016 von 17:30 bis 20:00 statt. Als Hilfsmittel sind Schreibzeug und ein handgeschriebenes DIN A4-Blatt (doppelseitig) zugelassen. Die Anmeldung zur Klausur in QISPOS ist bis inkl. Montag, dem 25.07.2016, möglich.