Voh. Klassifikationsschema für dyn. Gleichungen für Ordnungsparameter:

Kriterien: Ordnungsparameter erhalten oder nicht, Symmetrie, Rauschterme, ...

Modell A: skalare Ordnungsparameter, nicht erhalten.

$$\frac{\partial \phi(\underline{r},t)}{\partial t} = -\overset{\text{Mobilitätskonstante}}{M} \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\underline{r},t)} + \overset{\text{"Rauschen"}}{\eta(\underline{r},t)}$$

Relaxationsterm

$F[\phi]$: Ginzburg-Landau-Freie-Energie

$\langle \eta(\underline{r},t) \rangle = 0$

$\langle \eta(\underline{r},t)\eta(\underline{r}',t') \rangle = 2k_BTM\,\delta(\underline{r}-\underline{r}')\,\delta(t-t')$

es gilt also ein Fluktuations-Dissipations-Theorem (FDT)!

Zum FDT in den Ordnungsparametergleichungen ("mesoskopische" Gleichungen)

zw. mikroskopisch und makroskopisch

Beispiel: Modell A mit ortsunabhängigem Ordnungsparameter $\phi(t)$

(*) $$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\partial F}{\partial \phi} + \eta(t)$$

einfache partielle Ableitung

ebenfalls ortsunabhängig

mit $\langle \eta(t) \rangle = 0$

$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \Gamma\,\delta(t-t')$

Forderung: Im Gleichgewicht soll ϕ der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P^{eq}(\phi) \sim \underbrace{e^{-\beta F(\phi)}}_{\text{verallgemeinerter Boltzmannfaktor!}}$$

genügen (mit $\beta = \frac{1}{k_BT}$)

(Beachte: Die Abhängigkeit $\sim e^{-\beta F(\phi)}$ ersetzt hier die Abhängigkeit $\sim e^{-\beta H(\{\underline{r}\},\{\underline{p}\})}$ für die mikroskop. Freiheitsgrade!

Grund: mesoskopische Beschreibungsebene

Betrachte zunächst die Fokker-Planck-Gl. für die Verteilung $P(\phi)$ (noch nicht notwendigerweise im Gleichgewicht!), die ⊛ entspricht.

Fasse dazu ⊛ als verallgemeinerte Langevin-Gl. auf!

Kramers-Moyal-Koeffizienten: (ablesen!) (additives Rauschen)

$$K^{(1)} = -M\frac{\partial F(\phi)}{\partial \phi}, \quad K^{(2)} = \frac{\Gamma}{2}$$

$\Rightarrow$ Fokker-Planck-Gl.:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\phi,t) = \left(-\frac{\partial}{\partial \phi}\left(-M\frac{\partial F}{\partial \phi}\right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\frac{\Gamma}{2}\right)P(\phi,t)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \phi}\underbrace{\left(-M\frac{\partial F}{\partial \phi}P(\phi,t) - \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial}{\partial \phi}P(\phi,t)\right)}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \phi}J_\phi$$

Strom!

Gleichgewicht: $J_\phi = 0$, $P(\phi,t) \to P^{eq}(\phi)$

$$\Rightarrow \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial}{\partial \phi}P^{eq}(\phi) \overset{!}{=} -M\frac{\partial F}{\partial \phi}P^{eq}(\phi)$$

Lösung kann sofort hingeschrieben werden (s. Diskussion Fokker-Planck in 1 Dimension)

$$P^{eq}(\phi) = \exp\Big(\text{const} + \underbrace{\frac{2}{\Gamma}}_{(K^{(2)})^{-1}}\int_{\phi_0}^{\phi} d\phi' \overbrace{\left(-M\frac{\partial F}{\partial \phi}\right)}^{K^{(1)}}\Big)$$

$$\sim e^{-\frac{2M}{\Gamma}F(\phi)}$$

Wir hatten gefunden: $P^{eq}(\phi) \sim e^{-\beta F(\phi)}$

Mobilitäts Konstante

$$\Longrightarrow \beta \overset{!}{=} \frac{2M}{\Gamma} \iff \boxed{\Gamma \overset{!}{=} 2 M k_B T}$$

Stärke des Rauschens

q.e.d.

Modell B

Im Unterschied zu Modell A bleibt hier der Ordnungsparameter erhalten!

$$\Rightarrow \frac{\partial \phi(\underline{r},t)}{\partial t} = - \nabla \cdot \underline{j}(\underline{r},t)$$

Ginzburg-Landau Form

$$\text{mit } \underline{j}(\underline{r},t) = -M \nabla \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} + \underline{\zeta}^*(\underline{r},t)$$

$$\Longrightarrow \frac{\partial \phi(\underline{r},t)}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \phi} + \zeta(\underline{r},t) \qquad \text{mit } \zeta(\underline{r},t) = \nabla \cdot \underline{\zeta}^*(\underline{r},t)$$

Rauschen

Für $\zeta(\underline{r},t) = 0$ hat Modell B dieselbe Form wie die Cahn-Hilliard-Theorie!

$$\left(\phi(\underline{r},t) \rightarrow \rho(\underline{r},t) \right)$$

Anwendungen von Modell A

- ursprünglich für Supraleitung, Suprafluidität
- Magnetisierungsdynamik in einem Festkörper

  ↳ dieses Beispiel wollen wir hier diskutieren!

Ziel: Verständnis der Dynamik eines skalaren, nicht erhaltenen Ordnungsparameters in der Nähe eines Phasenübergangs zweiter Ordnung

Hintergrund:

Viele magnet. Festkörper weisen im Gleichgewicht einen Phasenübergang von einer paramagnetischen Hochtemperaturphase in eine ferromagnetische Tieftemperaturphase auf!

Betrachte hier System, indem Magnetisierung eine skalare Größe ist. — Kann aber orts- und zeitabhängig sein!

(z.B. aufgrund von Kristallanisotropie
→ Magnetisierung kann nur best. Richtungen annehmen
→ skalare Beschreibung genügt!)

Kurze Wiederholung der Beschreibung eines solchen Systems im Gleichgewicht auf Ordnungsparameterebene

Ginzburg-Landau-Funktional (impliziert "meanfield"-artige Beschreibung)

$$F[M] = \int d\underline{r} \left(\frac{a}{2}(T-T_c)\left(M(\underline{r},t)\right)^2 + \frac{b}{4}\left(M(\underline{r},t)\right)^4 + \frac{c}{2}\left(\nabla M(\underline{r},t)\right)^2 - M(\underline{r},t)\, H(\underline{r},t) \right)$$

externes Feld

vernachlässige Zeitabhängigkeiten (Gleichgewicht!)

Idee: Das statistische Gewicht einer Konfiguration $M(\underline{r})$ ist gegeben durch $e^{-\beta F[M]}$

$\Rightarrow$ die wahrscheinlichste Konfiguration ergibt sich aus $\frac{\delta F[M]}{\delta M(\underline{r})} \stackrel{!}{=} 0$

$$\Rightarrow \boxed{a(T-T_c)M(\underline{r}) + b\left(M(\underline{r})\right)^3 - c\,\Delta M(\underline{r}) - H(\underline{r}) \stackrel{!}{=} 0} \quad (*)$$

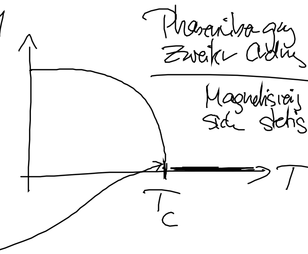
betrachte Fall $H(\underline{r})=0$, homogener Ordnungsparameter $M(\underline{r})=M$

$$a(T-T_c)M + bM^3 = 0$$

$T<T_c \Rightarrow M\neq 0 \quad a(T-T_c) + bM^2 = 0$

$$M \sim (T_c - T)^{\frac{1}{2}}$$

Magnetisierung dicht unterhalb von T_c



Phasenübergang zweiter Ordnung!

Magnetisierung verhält sich stetig!

Suszeptibilität: $\chi = \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H=0}$

Startpunkt: $a(T-T_c)M + bM^3 - H = 0$ (homogener Ordnungsparameter, homogenes Feld)

Ableiten nach H:

$$a(T-T_c)\frac{\partial M}{\partial H} + b\,3M^2\frac{\partial M}{\partial H} - 1 = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial M}{\partial H}\left(a(T-T_c) + 3bM^2\right) = 1$$

betrachte $T > T_c$: $M = 0$ $\Rightarrow$ $\underbrace{\frac{\partial M}{\partial H}}_{\chi} = \frac{1}{a(T-T_c)} \sim (T-T_c)^{-1}$.

Curie-Verhalten

Man nennt die Exponenten $\frac{1}{2}$ $\left(M \sim (T_c - T)^{\frac{1}{2}}\right)$ und 1 $\left(\chi \sim (T-T_c)^{-1}\right)$
kritische Exponenten. Hier ergeben sich die Meanfield-Werte!

(i.A.: Exponenten haben andere Werte, Universalität)

Frage nun

Dynamik des Ordnungsparameters $M(\underline{r},t)$ dicht am kritischen Punkt?

Idee:

~~Am~~ In der Nähe von T_c divergiert die Suszeptibilität, und die räumliche Korrelation des Ordnungsparameters werden langreichweitig (hier nicht gezeigt)

$\langle M(\underline{r})\, M(\underline{r}')\rangle$

d.h. die Korrelationslänge divergiert!

Was impliziert das für das zeitliche Verhalten?

Ansatz für die Zeitabhängigkeit (Modell A)

$$\boxed{\frac{\partial M(\underline{r},t)}{\partial t} = -\lambda \underbrace{\frac{\delta F[M]}{\delta M(\underline{r},t)}} + \eta(\underline{r},t)} \quad (**)$$

Relaxation ins Minimum von $F[\phi]$, $\lambda > 0$

Stochastischer Term (z.B. von schnellen Gitterschwingungen → rasch variierende stochastische Kraft!)

FDT : $\langle \eta(\underline{r},t)\eta(\underline{r}',t')\rangle = 2\lambda k_B T\, \delta(\underline{r}-\underline{r}')\,\delta(t-t')$

Auswertung von (**) durch Funktional-Ableitung von $F[M]$

$$\frac{\partial M(\underline{r},t)}{\partial t} = -\lambda\Big(a(T-T_c)M(\underline{r},t) + b\cancel{\big(M(\underline{r},t)\big)^3} - c\Delta M(\underline{r},t) + \cancel{M(\underline{r},t) H(\underline{r},t)}\Big) + \eta(\underline{r},t)$$

betrachte $H=0$ (kein äußeres Feld)

vernachlässige anharmonische Term $\sim M^3$

$\Rightarrow$ effektiv: Linearisierung !

Einfacher zu behandeln im Fourierraum

$$\tilde{M}(\underline{k},t) = \int d\underline{r}\; e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}\, M(\underline{r},t)$$

$$\Delta M(\underline{r},t) \longrightarrow -\underbrace{(\underline{k})^2}_{k^2} \hat{M}(\underline{k},t)$$

$$\tilde{\eta}(\underline{k},t) = \int d\underline{r}\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}\, \eta(\underline{r},t)$$

Rauschterm

$$\Longrightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t} \hat{M}(\underline{k},t) = -\lambda\left(a(T-T_c) + c k^2\right) \hat{M}(\underline{k},t) + \tilde{\eta}(\underline{k},t)}$$

Entkopplung bezgl. $\underline{k}$! $\qquad \forall \underline{k}$

Diese Gleichung hat (für jedes $\underline{k}$) genau dieselbe Struktur wie eine (verallgemeinerte) Langevin-Gleichung in einer Dimension !

$$\left(\dot{\underline{v}} = -\gamma \underline{v} + \underline{f}(t) \right)$$

Geschw. eines Kolloids

$\Rightarrow$ Wir können sofort schließen.

$$\hat{M}(\underline{k},t) = \hat{M}(\underline{k},0)\, e^{-\gamma_k t} + e^{-\gamma_k t} \int_0^t dt'\, e^{\gamma_k t'}\, \tilde{\eta}(\underline{k},t)$$

für jede Realisierung des Rauschens !

mit $\gamma_k = \lambda\left(a(T-T_c) + c k^2\right)$

Wir wollen nun Mittelwerte und Schwankungen von $\hat{M}(\underline{k},t)$ ausrechnen !

$$\langle \hat{M}(\underline{k},t) \rangle = \hat{M}(\underline{k},0)\, e^{-\gamma_k t} \qquad \left(\text{wegen } \langle \tilde{\eta}(\underline{k},t) \rangle = 0\right)$$

Exponentielles Abklingen der Anfangsmagnetisierung

Korrelationsfunktion (Schwankung)

s. Langevin-Theorie

$$\langle \tilde{M}(\underline{k},t)\,\tilde{M}(\underline{k},t')\rangle = \frac{\lambda k_B T}{\gamma_k}\, e^{-\gamma_k(|t-t'|)} + e^{-\gamma_k(t+t')}\left(\langle(\tilde{M}(\underline{k},0))^2\rangle - \frac{\lambda k_B T}{\gamma_k}\right)$$

z.B. über Ginzburg-Landau-Theorie

beachte: im Gleichgewicht gilt:

benutze Def. von γ_k

$$\langle(\tilde{M}(\underline{k},0))^2\rangle = \frac{\lambda k_B T}{\gamma_k} = \frac{\lambda}{a(T-T_C)+ck^2}$$

$$\Rightarrow \langle \tilde{M}(\underline{k},t)\,\tilde{M}(\underline{k},t')\rangle = \frac{k_B T \lambda}{\gamma_k}\, e^{-\gamma_k(|t-t'|)} = \frac{k_B T}{a(T-T_C)+ck^2}\, e^{-\gamma_k|t-t'|}$$

Folgerung:

Die zeitlichen Korrelation der Magnetisierung in der Nähe des kritischen Punktes (da wir Linearisiert haben!) zerfallen exponentielle mit der Relaxationsrate

$$\gamma_k = \lambda\left(a(T-T_C)+ck^2\right)$$

Man sieht:

Bei festem $k=|\underline{k}|$ wird γ_k für $T\to T_C$ drastisch kleiner

(Insbesondere: Für $k\to 0$ und $T\to T_C$ geht $\gamma_k\to 0$)

$\Rightarrow$ die Zeit-Korrelation klingen immer langsamer ab!

„critical slowing down" !

Meßbar durch dynamische Streuexperimente

Typisches Phänomen in der Nähe eines Phasenübergangs zweiter Ordnung