Phasenübergänge + 1D Ising-Modell

Über Zustandsgleichungen ⇒ funktioneller Zusammenhang

- van-der-Waals-Gleichung $\quad f(p, V, T) = 0$

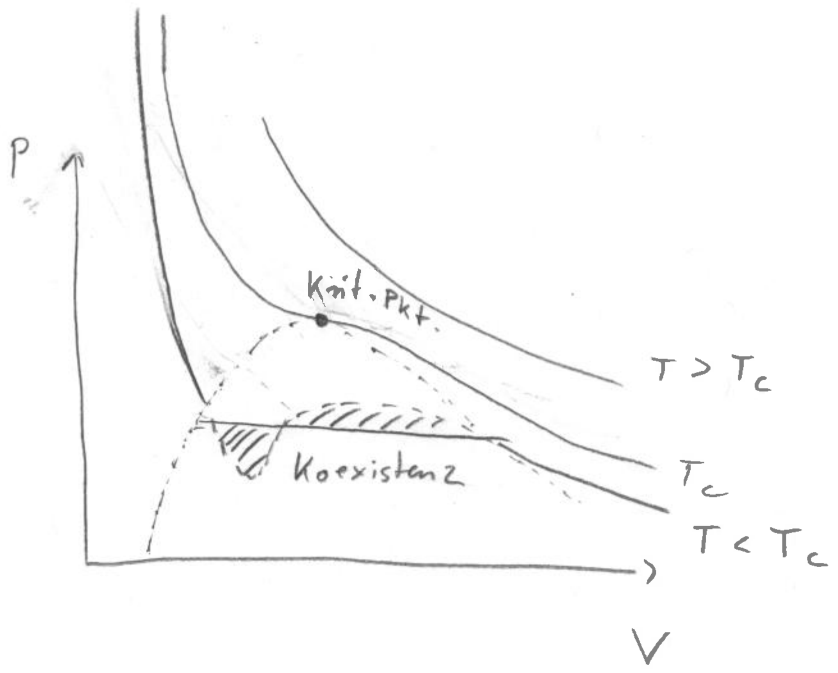
  (1873, 1910 Nobelpreis) $\quad \tilde{f}(p, \rho, T) = 0$

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \qquad \text{(für ein Mol)}$$

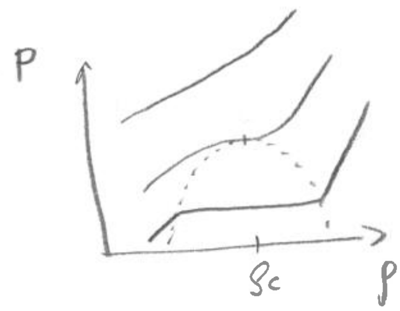
$a \equiv$ Kohäsionsdruck $\qquad \left(\frac{a}{V^2}\right.$ Binnendruck$\left.\right)$

$b \equiv$ Kovolumen $\qquad$ "mean field"-Näherung

$$V^3 - \frac{b + RT}{p} V^2 + \frac{a}{b} V + \frac{ab}{p} = 0$$



oder linear



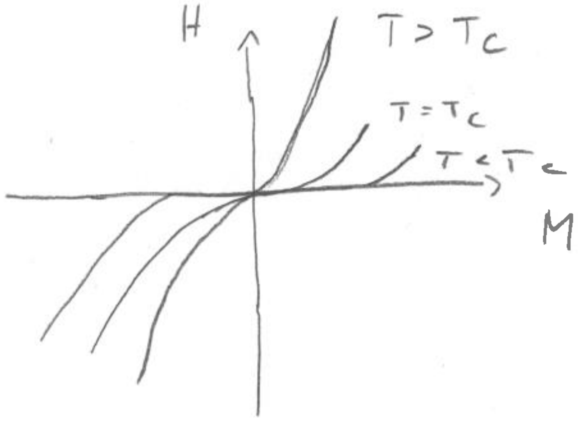
$$p \sim T\rho$$

Analogie zum Ferromagnetismus

- Druck auf Stoff => höhere Dichte
- Magnetfeld auf Ferromagneten => Magnetisierung höher

$p \,\hat{=}\, H$ Magnetfeld

$\rho \,\hat{=}\, M$ Magnetisierung



Fortsetzen erst nach 4

magnetische Suszeptibilität

$$\chi_T = \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_T \quad \text{divergiert}$$

1907

Pierre Weiss : Theorie des Ferromagnetismus
in Analogie zu van der Waals
mit Molekularfeld-Approximation

1920/25

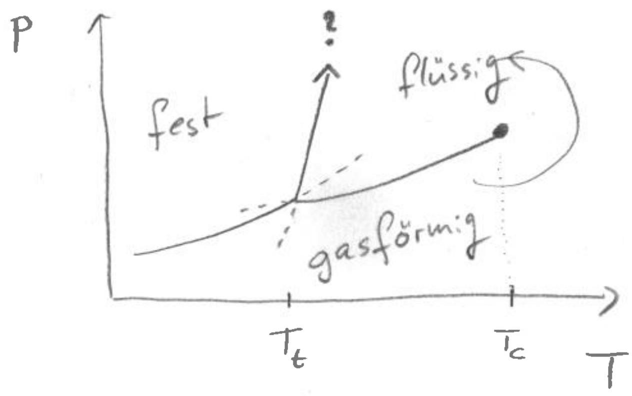
Wilhelm Lenz : Ising Modell (Ernst Ising, 1925)

1928

Werner Heisenberg : Quantentheorie

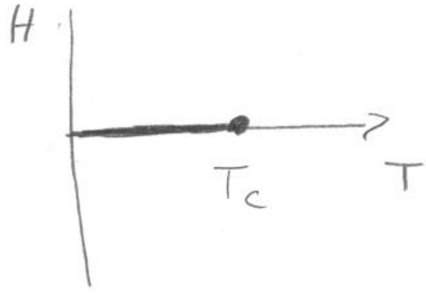
Phasenübergänge im pT-Schnitt (HT)

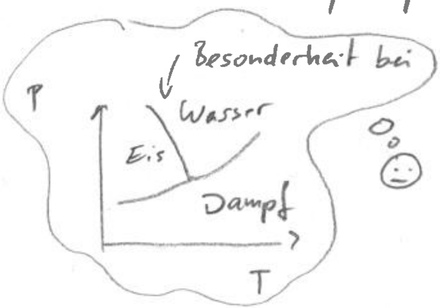
"Stoffe"



Tripelpunkt Kritischer Punkt

Magnete





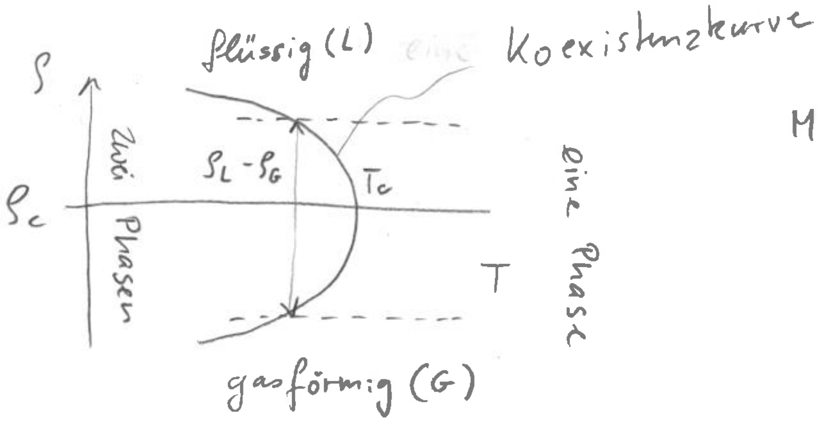
- andere Phasenübergänge
  - Metall-Isolator Übergang
  - Supraleitung
  - Suprafluidität
  -

Die Abwesenheit eines Kondensats wurde zunächst irrtümlich für Existenz permanenter Gase gehalten.

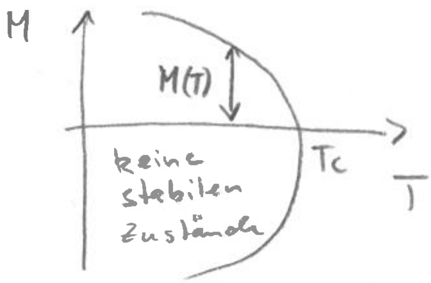
Beispiel Helium $T_c = 5.2\ K$

Phasenübergänge im ρT Schnitt (MT)

Stoffe



Magnet



Formale Analogie über Gittergasmodell

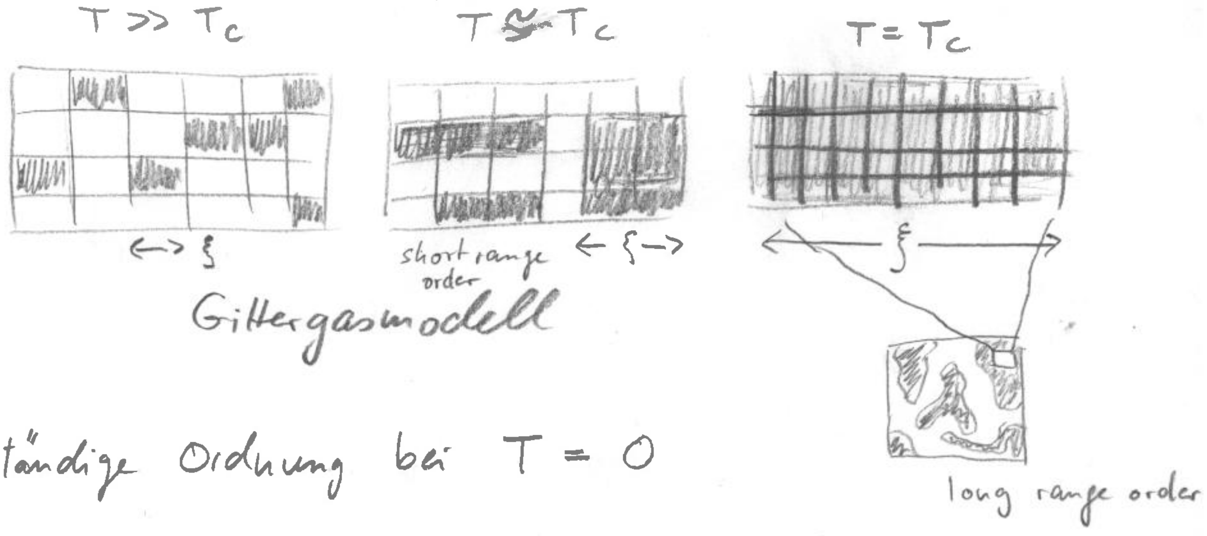
$$\varepsilon \equiv \frac{T - T_c}{T_c}$$

$$\rho_c - \rho_G \sim |\varepsilon|^{\beta_G}$$

$$\rho_L - \rho_c \sim |\varepsilon|^{\beta_L}$$

mit $\beta_G \simeq \beta_L$

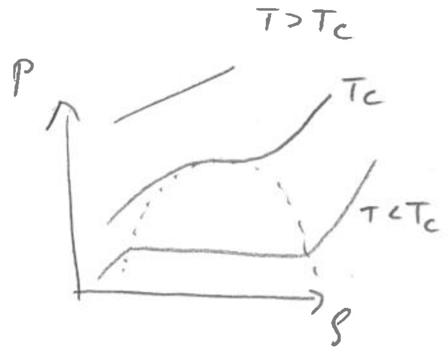
$$\underbrace{\rho_L - \rho_G}_{\text{Ordnungsparameter}} \sim |\varepsilon|^{\beta}$$



Gittergasmodell

Vollständige Ordnung bei $T = 0$

bei $T = T_c$ gilt Ordnungsparameter $= 0$



$$\frac{\partial P}{\partial \varrho} \to 0 \quad \text{für} \quad T \to T_c^+$$

$$K_T = -\varrho^{-1} \left.\frac{\partial \varrho}{\partial P}\right|_T$$ isotherme Kompressibilität

$$\left(= \frac{1}{pV} \left.\frac{\partial F}{\partial p}\right|_{T,N} \right)$$ F: Freie Energie

$\Rightarrow$ divergiert wenn $T \to T_c^+$

Dichte ändert sich sprunghaft (große Fluktuationen)

Das Ising Modell

Modell eines Ferromagneten (oder Antiferromagnet)

Freiheitsgrade durch Ising-Spins $\sigma_i = \pm 1$
auf ein Gitter. $i = 1 \ldots N$, als 2^N Zustände

- externes Feld kann in Prinzip auch von Gitterpunkt zu Gitterpunkt variiren H_i
- Spininteraktion untereinander J_{ij}, K_{ijk}, ...
  für zwei, drei, ... Spins

$\Rightarrow$ Hamiltonfunktion

$$-H_\Omega = \sum_{i\in\Omega} H_i \sigma_i + \sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum K_{ijk}\sigma_i\sigma_j\sigma_k + \ldots$$

- Nur ~~Spin-~~Spin-Wechselw. $\Rightarrow$ $K_{ijk} = 0$, ...
- $J_{ij} = \frac{K}{k_B T} > 0$ (nur nächste Nachbarn und konstant auf dem Gitter, >0 (ferromagnetisch)
  Spin-Spin-Wechselwirkungsstärke
- $H = 0$ kein externes Feld
- (zunächst) 1D Gitter (1925 Ising)

↑↑↑↑↓↑↑ erwarten wir für niedrige T.

↑↓↓↑↑↑↓↑↑ " " " hohe T
(keine Magnetisierung)

Phasenübergang ?

$$-\beta H = \sum_{j=1}^{N} K \sigma_j \sigma_{j+1}$$ mit $\sigma_{N+j} = \sigma_j$ periodischen Randbedingungen

Zustandssumme

$$Z = \sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_N} e^{K\sigma_1\sigma_2} e^{K\sigma_2\sigma_3} \ldots e^{K\sigma_N\sigma_1}$$

Notation

$$\sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_N} \equiv \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \sum_{\sigma_2 = \pm 2} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \left(\equiv \mathrm{Tr} \right)$$

Alternative Schreibweise

Kann es überhaupt zu einem Phasenübergang kommen? Betrachte freie Energie

$$F = -k_B T \log \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_\Omega}$$

Thermodynamischen Eigenschaften durch Ableitungen.

Beispiel $$\frac{\partial F_\Omega}{\partial H_i} = -k_B T \frac{1}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_\Omega}} \cdot \mathrm{Tr} \frac{\sigma_i}{k_B T} e^{-\beta H_\Omega}$$

$$= - \langle \sigma_i \rangle_\Omega$$

Ein paar Überlegungen

- aus $\sigma \in \{-1, 1\}$ folgt $(\sigma\sigma')^2 = 1$

- $$e^{K\sigma\sigma'} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} K^i (\sigma\sigma')^i$$
$$= \sum_{i \text{ gerade}} \frac{1}{i!} K^i + \sigma\sigma' \Big(\sum_{i \text{ ungerade}} \frac{1}{i!} K^i \Big)$$
$$= \cosh K + \sigma\sigma' (\sinh K) \qquad (a)$$
$$= \cosh K \,(1 + \sigma\sigma' \tanh K) \qquad (b)$$

- $$e^{K\sigma\sigma'} = \frac{1+\sigma\sigma'}{2} e^{K} + \frac{1-\sigma\sigma'}{2} e^{-K}$$
$$= e^{K} \Big(\frac{1+\sigma\sigma'}{2} + \frac{1-\sigma\sigma'}{2} e^{-2K} \Big) \qquad (c)$$

- $\langle \sigma_i \rangle = 0 \quad ; \quad \langle \sigma_i^2 \rangle = 1$

Zustandsfunktion

$$Z = \sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_N} (\cosh K)^N (1 + \sigma_1\sigma_2 \tanh K)(1 + \sigma_2\sigma_3 \tanh K) \ldots (1 + \sigma_N \sigma_{N+1} \tanh K)$$

$$= 2^N (\cosh K)^N \langle \ldots \rangle$$ Mittelwert der Summanden

$$= 2^N (\cosh K)^N \left[1 + (\tanh K)^N \right]$$

$$= 2^N \left((\cosh K)^N + (\sinh K)^N \right)$$

Mit dem Thermodynamischen Grenzfall geht's weiter!