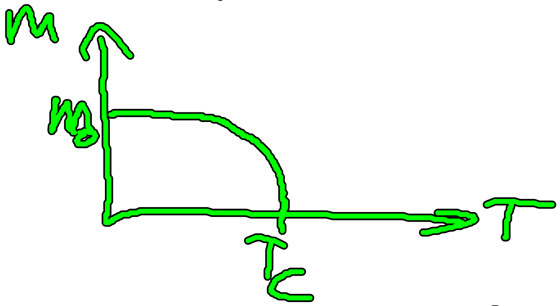
Phasenübergänge 2. Ordnung



Ferromagnetismus

OP verhält sich stetig, Suszeptibilität divergiert

⇒ „kritisches Phänomen“

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

β ← krit. Exponent

OP: $m \sim (-\varepsilon)^{\beta}$

Suszeptibilität $\chi \sim (+\varepsilon)^{-\gamma}$

Korrelationslänge $\xi \sim \varepsilon^{-\nu}$ (siehe z.B. Ornstein-Zernike Theorie)

Korrelationslänge:

Ornstein-Zernike-Theorie

$$h(r) \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r} \quad (d=3), \ \eta = 0$$

totale Korrelationsfunktion

$\sim$ Dichte-Dichte-Korrelationsfkt.

$$\langle \rho(\underline{r})\,\rho(\underline{r}')\rangle - \rho^2$$

allgemeinere Form für die Korrelationsfunktion

$$h(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} e^{-r/\xi}$$

; d : Raumdimension

Exponent η mit $\eta \approx 0.03$ in $d=3$

↳ mißt Abweichung vom klassischen Ornstein-Zernike-Verhalten!

im Prinzip ist η (wie auch ξ) meßbar durch Streuexperiment!

$$S(q) = 1 + \rho \tilde{h}(q)$$

Strukturfaktor

es stellt sich aber heraus, daß man die Abweichung vom OZ-Verhalten nur schwer sieht!

↳ liefert sehr gute Beschreibung für Temperaturen nicht zu dicht an T_c

Kritische Exponenten

$\underbrace{\text{van-der-Waals}}$ -Werte nicht ganz richtig!

genauso:
Weiß'sche Theorie
$\underbrace{\text{des Ferromagnetismus}}$
Molekularfeldtheorien (MF)

Universalitätshypothese (R.B. Griffiths, 1970)

Details des betrachteten physikalischen Systems (d.h. der mikroskopischen Wechselwirkungen) werden unwichtig, wenn man dicht genug am krit. Punkt ist!

Grund:
In der Nähe von T_c werden Korrelationen langreichweitig! → Nur noch Verhalten auf großen Längenskalen relevant!

$\Rightarrow$ krit. Exponenten hängen nun noch von sehr wenigen Faktoren ab:

- Raumdimension (d)
- Dimension des Ordnungsparameters (n)
  "Spin-Dimension"

z.B. Kondensation: OP ϱ: $\Leftrightarrow n=1$

Ferromagnet $m \Leftrightarrow n=1$
(Ising)

$\underline{m} \Leftrightarrow n=3$

→ • Reichweite der Wechselwirkung

"kurzreichweitige" System

verhalten sich anders als Systeme mit langreichweitigen, elektrostatischen Wechselwirkung!

z.B. Lennard-Jones Wechselwirkung;

$\left(u(r) \sim \frac{1}{r} \right.$, $\left. u(r) \sim \frac{1}{r^3} \right)$

Coulomb — Dipol-Dipol

Werte von krit. Exponenten

z.B. $m \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{\beta}$

Ordnungsparameters

MF-Theorien: $\beta = \frac{1}{2}$

Ising-Magnet $(n=1)$

$d=2$: $\beta \approx 0.125$

$d=3$: $\beta \approx 0.325$

Heisenberg-Magnet $(n=3)$

$d=3$: $\beta \approx 0.365$

→ aus Computersimulationen, Renormierungsgruppentheorien

Konsequenz der Universalität:

Kondensierende Flüssigkeit (OP: $\Delta \rho$),

entmischende mehrkomponentige Flüssigkeit,

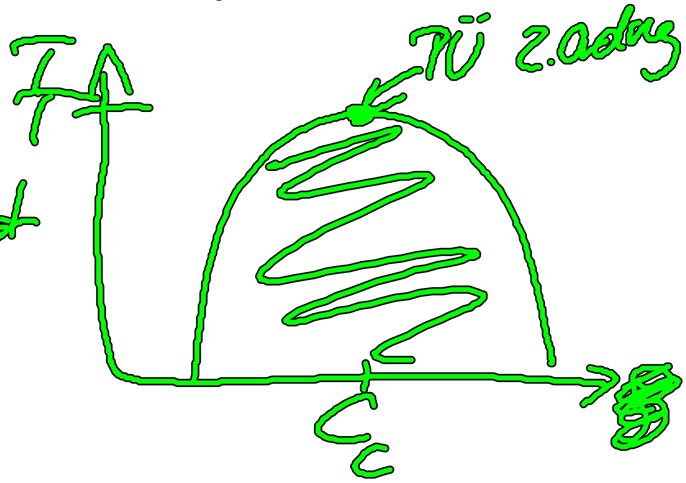
(OP: $\underbrace{\Delta c}_{\text{Konzentrationsdifferenz}}$)

und der Ising-Ferromagnet in $d=3$ sind alle in derselben "Universalitätsklasse"!

→ sie sind durch dieselben Exponenten gekennzeichnet!

kritisches Verhalten

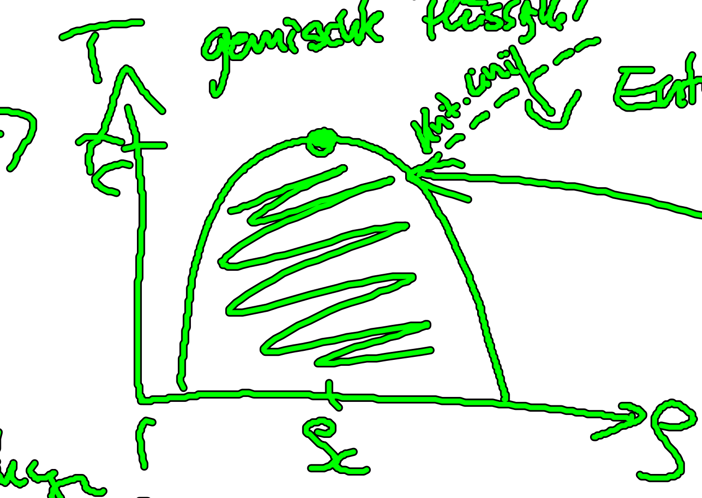
$\rho = \text{const}$



binäre Flüssigkeitsmischung (OP: Dichte und Konzentration!)

c: Konzentration der einen Komponente

gemischte Flüssigkeit!



Entmischungsphasenübergang 2. Ordnung

trikritischer Punkt (MF-Theorie korrekt bis auf logarithmische Korrekturen!)

z.B. He-Mischungen!

III. Spinsysteme

III.1. Theorie nicht-wechselwirkender Spins
(Theorie des Paramagnetismus)

Betrachte Teilchen mit permanentem magnet. Moment μ_i

Festkörper aus

quantenmechanisch:

$$\mu_i \rightarrow \hat{\mu}_i \quad \text{(Operator)}$$

bekannt:

$$\hat{\mu}_i = -\frac{g}{\hbar}\,\mu_B\,\underline{\hat{J}}_i$$

Landé-Faktor

Bohr'sches Magneton

Drehimpulsoperator

Zustandssumme?

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_i \cdot \underline{B}_0 = \frac{g}{\hbar}\mu_B \sum_{i=1}^{N} \underline{\hat{J}}_i \cdot \underline{B}_0$$

äußeres Magnetfeld

Kanonische Zustandssumme

$$Z_K = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}$$

Spur

Spur ist unabhängig von der Wahl der quantenmechan. Zustände! (man kann "bequeme" Darstellung benutzen)

nehme: $\underline{B}_0 = B_0 \underline{\hat{e}}_z$ Einheitsvektor in z-Richtung

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{g}{\hbar}\mu_B \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{i,z} B_0$$

benutze Eigenzustände

$J_{i,z} |j, m_i\rangle = \hbar m_i |j, m_i\rangle$

mit $m_i = -J, \dots, J$

$$\Rightarrow Z_K = \sum_{m_1=-J}^{J} \sum_{m_2=-J}^{J} \cdots \sum_{m_N=-J}^{J} e^{-\beta g \mu_B B_0 \sum_{i=1}^{N} m_i}$$

$\times\, e$

$$\tilde{B}_0 = g\mu_B B_0$$

$$Z_N = \prod_{i=1}^{N} \left(\sum_{m=-J}^{J} e^{-\beta \hat{B}_0 m} \right) \quad \text{Faktorisierung!}$$

$$= \left(\sum_{m=-J}^{J} e^{-\beta \hat{B}_0 m} \right)^N$$

$$= \left(e^{\beta \hat{B}_0 J} + e^{\beta \hat{B}_0 (J-1)} + \ldots + e^{-\beta \hat{B}_0 J} \right)^N$$

$$Z_N = \left(e^{-\beta \hat{B}_0 J} \left(e^{2\beta \hat{B}_0 J} + e^{\beta \hat{B}_0 (2J-1)} + \ldots + 1 \right) \right)^N$$

$$= \left(e^{-\beta \hat{B}_0 J} \sum_{k=0}^{2J} e^{\beta \hat{B}_0 k} \right)^N$$

geometr. Reihe: $\displaystyle\sum_{k=0}^{n} a_0 q^k = a_0 \frac{1-q^{n+1}}{1-q}$

mit $q = e^{\beta \hat{B}_0}$ hier

$$Z_N = \left(e^{-\beta \hat{B}_0 J} \left(\frac{1 - e^{\beta \hat{B}_0 (2J+1)}}{1 - e^{\beta \hat{B}_0}} \right) \right)^N$$

$$= \ldots\ldots = \frac{e^{-\beta \hat{B}_0 (J+\frac{1}{2})} - e^{\beta \hat{B}_0 (J+\frac{1}{2})}}{e^{-\beta \hat{B}_0/2} - e^{\beta \hat{B}_0/2}}$$

$$Z_N = \left(\frac{\sinh\left(\beta \hat{B}_0 (J+\frac{1}{2})\right)}{\sinh \beta \hat{B}_0 / 2} \right)^N$$

Resultierende Magnetisierung des Paramagneten

Gesamt-Magnetisierung

$$\underline{M}(T, \hat{B}_0) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_i \right\rangle$$ ← kanon. Mittelwert

(beachte
$$\langle \ldots \rangle = \frac{\mathrm{Tr} \ldots e^{-\beta \hat{H}}}{Z_N}$$

mit $\underline{B}_0 = B_0 \underline{e}_z$
$\underline{M}$ hat nur z-Komponente!

$$M_z(T, \hat{B}_0) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_{i,z} \right\rangle$$
$$= -g\mu_B \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hbar^{-1} \hat{J}_{iz} \right\rangle$$

berechne

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{J}_{iz}}{\hbar} \right\rangle = \frac{1}{Z_N} \mathrm{Tr}\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{J}_{iz}}{\hbar} \right) e^{-\beta \hat{H}}$$

benutze Eigenzustände

$$= \frac{1}{Z_N} \sum_{m_1=-J}^{J} \cdots \sum_{m_N=-J}^{J} \left(\sum_{i=1}^{N} m_i \right) e^{-\beta B_0 \sum_{i=1}^{N} m_i}$$

$$= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B_0} \ln Z_N$$

Damit

$$M_z(T, \hat{B}_0) = \frac{g\mu_B}{\beta} \frac{\partial}{\partial B_0} \ln Z_N$$

$$= \frac{g\mu_B}{\beta} N \frac{\partial}{\partial B_0} \left(\ln \left(\frac{\sinh\left(\beta B_0 (J+\frac{1}{2})\right)}{\sinh \beta B_0/2} \right) \right)$$

<u>Ergebnis</u>

$$M_z(T, \hat{B}_0) = N g\mu_B \left(\coth\left(\beta \hat{B}_0 (J+\tfrac{1}{2})\right) \cdot (J+\tfrac{1}{2}) - \coth\left(\beta \hat{B}_0/2\right) \cdot \frac{1}{2} \right)$$

definiere die sogenannte Brillouin-Funktion

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{x}{2J}\right)$$

$\Rightarrow$ Magnetisierung:

$$M_z(T, \hat{B}_0) = N g \mu_B J \cdot B_J\Big(\underbrace{g \mu_B J B_0}_{x}\Big)$$

extensiv!