

# Thermodynamischer Grenzfall

XVI (1)

$N \rightarrow \infty$  Große Systeme, d.h. thermodynamische Grenzfall

$$Z = 2^N (\cosh K)^N$$

$$\log Z = N \log 2 \cosh K$$

freie Energie <sup>↑</sup> extensive Größe nur im thermo. G.

( auch die verschiedenen Ensemble führen nur in diesem Grenzfall zu äquivalenten thermodyn. Fkt. )

Wie entstehen denn nun Phasenübergänge im thermodynamischen Grenzfall?

Asymptotische statistische Eigenschaften von Systemen  $\Omega$ , deren linearen Dimensionen  $L$  (Abmessungen) unendlich werden!

Es sei  $H_\Omega$  Hamiltonian <sup>Anzahl Dimensionen</sup>  
 $V(\Omega) \sim L^d$  Volumen  
 $S(\Omega) \sim L^{d-1}$  Rand

Bei endlichen Systemen  $\Omega$  müssen Randbedingungen geklärt sein (periodisch, harte Wand ....)

Allgemein

$$-\beta H_\Omega = \sum_n K_n \Theta_n$$

$K_n$  Kopplungskonstanten, externe (control) Parameter

$\Theta_n$  Lokale Operatoren, d.h. Kombination der

Interaktion der Freiheitsgrade

(siehe IV 6)  $\Theta_1 = \sum_i \sigma_i^x$

$\Theta_2 = \sum_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$ )

$$Z[\{K_n\}] \equiv \text{Tr} e^{-\beta H_\Omega}$$

mit Tr Summe über alle Zustände die die Freiheitsgrade erlauben.

$$F_\Omega[\{K_n\}] = -k_B T \log Z_\Omega$$

(Achtung: Bei spontaner Symmetriebrechung)

Für endliche Systeme

$$F_\Omega = V(\Omega) f_b + S(\Omega) f_s + \mathcal{O}(L^{d-2})$$

Grenzfall

$$\text{mit } f_b[\{K_n\}] \equiv \lim_{V(\Omega) \rightarrow \infty} \frac{F_\Omega[\{K_n\}]}{V(\Omega)} \equiv \lim_{N(\Omega) \rightarrow \infty} \frac{F_\Omega[\{K_n\}]}{N(\Omega)}$$

"bulk free energy" mit  $\frac{N(\Omega)}{V(\Omega)}$  konstant

$$f_s[\{K_n\}] \equiv \lim_{S(\Omega) \rightarrow \infty} \frac{F_\Omega[\{K_n\}] - V(\Omega) f_b[\{K_n\}]}{S(\Omega)}$$

Thermodynamische Eigenschaften ist in den

Ableitungen  $\frac{\partial F_a}{\partial k_n}$ ,  $\frac{\partial^2 F_a}{\partial k_n \partial k_m}$ , ... enthalten

bulk effekte, surface effekte, finite-size effekte

Keine Information zu Phasenübergängen!

Existiert der Grenzfall immer?

Hinweis: The stability of matter, Rev. Mod. Phys 48, 553 (1976)


Elliot H. Lieb

Zwei-Körper-Problem mit  $U(\underline{r}_i - \underline{r}_j)$  im Hamilton-Operator

verhindert Lösung schrittweise von  $N=1 \Rightarrow N=$  viele

Beim Coulomb'schen Gesetz  $F \sim \frac{1}{r^2}$  (Kraft)

Potential  $U \sim \frac{1}{r}$

Sphäre 

Besonderheit in 3D =

sphärisch-symmetrische Massenverteilung  $\equiv$  Punktladung im Zentrum

bei externer Betrachtung  $\dots \Rightarrow$  kein thermody Limes

$E(R) \sim \rho^2 R^5$

$E_b \sim \rho^2 R^2$

da  $E \rightarrow \infty$  für  $R \rightarrow \infty$

Für andere Potenzgesetze  $U = \frac{1}{|r-r'|^\sigma}$  ( $F = E - TS$ )

$$E(R) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} d^d r d^d r' \rho(r) U(r-r') \rho(r')$$

$\sim \rho^2 R^{2d-\sigma}$

Innere Energie im "bulk"

$$E_b \equiv \frac{E(k)}{V(k)} \sim R^{d-5}$$

Ohne Interaktion wäre alles mit 0D Ising-Modell geklärt

$H_i$ : externe Magnetfeld ( $\mu B$ )

$i = 1$  (d.h. 0D)

$$H_i(\sigma_i) = -H_i \sigma_i$$

$$P(1) = z_i^{-1} e^{-\beta H_i}$$

$$P(-1) = z_i^{-1} e^{\beta H_i}$$

$$P(1) + P(-1) = 1 \Rightarrow$$

$$z_i = 2 \cosh \beta H_i$$

$$\langle \sigma_i \rangle = P(1) - P(-1) = z_i^{-1} (e^{+\beta H_i} - e^{-\beta H_i}) = \tanh \beta H_i$$

# Korrelation und Bloch-Wand

(5)

## Mittelwerte

kl.  $\langle X \rangle = \sum p_i X_i = \int d\Gamma g(\Gamma) X(\Gamma)$

qm  $\langle X \rangle = \sum_{\alpha} \langle \alpha | X | \alpha \rangle p(\alpha)$

$$p(\Gamma) = \frac{e^{-\beta H(\Gamma)}}{Z(\beta)}$$

$$p(\alpha) = \frac{e^{-\beta E_{\alpha}}}{Z(\beta)}$$

s. IV §(b) + Mittelwert d. Summanden

$$Z = (2 \cosh k)^N \left\langle \prod_{j=1}^N (1 + \sigma_j \sigma_{j+1} \tanh K) \right\rangle$$

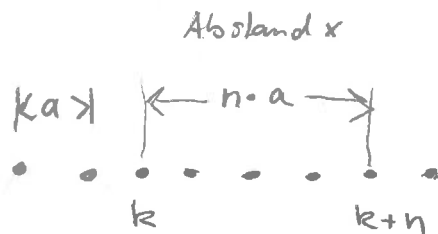
## Korrelationsfunktion

$$Z \langle \sigma_k \sigma_{k+n} \rangle = \sum e^{-\beta H} \sigma_k \sigma_{k+n}$$

$$= (2 \cosh k)^N \left\langle (1 + \sigma_1 \sigma_2 \tanh k) \dots (1 + \sigma_{k-1} \sigma_k \tanh k) \sigma_k (1 + \sigma_k \sigma_{k+1} \tanh k) \dots \right. \\ \left. (1 + \sigma_{k+n-1} \sigma_{k+n} \tanh k) \sigma_{k+n} (1 + \sigma_{k+n} \sigma_{k+n+1} \tanh k) \dots \right\rangle$$

$$\cong (\tanh k)^n \quad \text{da } n \ll N$$

$$\langle \sigma_k \sigma_{k+n} \rangle = \frac{1}{Z} e^{-\frac{na}{\xi}}$$



$\xi \equiv$  Abklingrate / Korrelationslänge

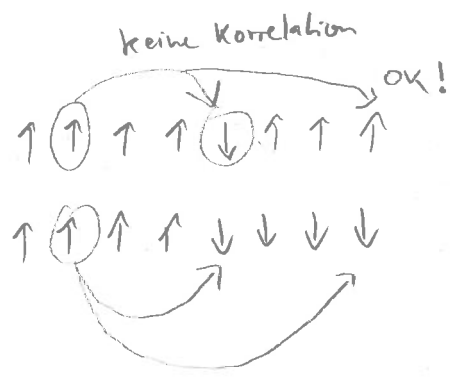
$$\xi = \frac{a}{\ln(\tanh k)^{-1}} \quad \begin{matrix} \nearrow \infty & \text{für } k \rightarrow \infty & \checkmark \\ \searrow 0 & \text{" } k \rightarrow 0 & \checkmark \end{matrix}$$

mit  $\cdot \tanh K = \frac{e^K - e^{-K}}{e^K + e^{-K}} = \frac{1 - e^{-2K}}{1 + e^{-2K}} \approx 1 - 2e^{-2K} + \dots$

$\cdot \tanh^{-1} K \approx 1 + 2e^{-2K}$

$\cdot \log(1 + \epsilon) \approx \epsilon$

$\xi \approx a e^{2K}$  für große  $K$



Punktdefekt kostet  $e^{-4K}$

Bloch-Wand  $e^{-2K}$

korrespondiert zur Korrelationslänge  $\xi$