

Seminar zur Theorie der Teilchen und Felder  
Phasenübergänge und kritische Phänomene

**Landau-Theorie**  
**für Phasenübergänge 2. Ordnung**

Semir Vrana

10.05.2012

## **INHALTSVERZEICHNIS**

---

### **Inhaltsverzeichnis**

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>   | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Ferromagnetismus</b>   | <b>1</b>  |
| <b>3</b> | <b>Landau-Theorie</b>   | <b>5</b>  |
| <b>4</b> | <b>Kritische Exponenten</b>                                       | <b>7</b>  |
| <b>5</b> | <b>Fluktuationen</b>  | <b>10</b> |
| <b>6</b> | <b>Thermische Fluktuationen und Gültigkeit der Landau-Theorie</b> | <b>11</b> |
| <b>7</b> | <b>Zusammenfassung</b>  | <b>12</b> |

## 1 Einleitung

Makroskopische Systeme können in verschiedenen Phasen auftreten. So kann Wasser fest, flüssig oder gasförmig sein und ein Metall ferro- oder paramagnetisch.

Bei Übergängen zwischen zwei Phasen treten im Allgemeinen markante Änderungen einer makroskopischen Größe auf. Diese Größen werden *Ordnungsparameter* genannt und stellen den Ausgangspunkt in der Betrachtung von Phasenübergängen dar. Beispiele für Ordnungsparameter sind

$$\psi = \begin{cases} M/M_0 & \text{paramagnetisch-ferromagnetisch,} \\ \sqrt{N_0/N} & \text{Bose-Einstein-Kondensation,} \\ (v - v_c)/v_c & \text{gasförmig-flüssig.} \end{cases} \quad (1.1)$$

Dabei ist hier  $M$  die Magnetisierung des Systems,  $M_0$  die Maximalmagnetisierung,  $N_0$  die Besetzung des Grundzustands,  $N$  die Anzahl der Teilchen im System,  $v$  das Volumen pro Teilchen und  $v_c$  das Volumen am kritischen Punkt.

All diese Ordnungsparameter  $\psi$  beschreiben den Phasenübergang dadurch, dass

$$\psi \begin{cases} = 0 & T \geq T_c \\ \neq 0 & T < T_c \end{cases} \quad (1.2)$$

gilt.

Ein weiteres Merkmal von Phasenübergängen ist, dass viele physikalische Größen ein universellen, also von betrachteten System unabhängiges Potenzverhalten um die kritische Temperatur  $T_c$ , bei der der Phasenübergang stattfindet, zeigen: Es gilt

$$\text{Spezifische Wärme} \quad C \sim |t|^{-\alpha} \quad (1.3)$$

$$\text{Ordnungsparameter für } t < 0 \quad \psi_0 \sim |t|^\beta \quad (1.4)$$

$$\text{Suszeptibilität} \quad \chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (1.5)$$

$$\psi - h - \text{Relation bei } t = 0 \quad h \sim |\bar{\psi}|^\delta \quad (1.6)$$

$$\text{Korrelationslänge} \quad \xi \sim |t|^{-\nu} \quad (1.7)$$

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

$\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu$  bezeichnet man als kritische Exponenten.  $h$  ist ein äußeres Feld, dass am System anliegen kann.  $t$  bezeichnet man als reduzierte Temperatur.

Dies legt die Möglichkeit einer allgemeinen Beschreibung nahe und die Landau-Theorie stellt einen Versuch dar, genau das zu erreichen.

## 2 Ferromagnetismus

Bevor die Landau-Theorie als eine allgemeine Theorie für Phasenübergänge hergeleitet werden soll, soll zunächst der Ferromagnetismus als ein spezielles Modell betrachtet werden, das später als Vorbild für die Landautheorie dienen kann.

Im Rahmen der Heisenbergmodells wird ein ferromagnetisches System beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = 2 \sum_i \mu_B \hat{s}_i \cdot \vec{B} - I \sum_{\{i,j\}} \hat{s}_i \cdot \hat{s}_j. \quad (2.1)$$

Dabei bezeichnet  $\vec{B}$  ein anliegendes Magnetfeld,  $\vec{s}_i$  den Spin des  $i$ -ten Teilchens und  $\{i, j\}$ , dass über alle Nachbarpaare summiert werden soll.

Das Spektrum von  $\hat{H}$  soll nun in der Molekularfeldnäherung bestimmt werden. Dazu wird die Wechselwirkung des Spins untereinander durch das mittlere Feld der nächsten Nachbarn ersetzt,

$$\sum_{\{i, j\}} \hat{\vec{s}}_i \cdot \hat{\vec{s}}_j = \sum_i \hat{\vec{s}}_i \cdot \sum_{j: \text{Nachbarn von } i} \hat{\vec{s}}_j \approx \left( \sum_i \hat{\vec{s}}_i \right) \cdot \nu \langle \vec{s} \rangle. \quad (2.2)$$

Dabei ist  $\nu$  die Anzahl der nächsten Nachbarn und  $\langle \vec{s} \rangle$  der statistische Mittelwert der benachbarten Spins.

Damit lautet der neue effektive Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{\text{eff}} = 2 \sum_i \mu_B \hat{\vec{s}}_i \cdot \left( \vec{B} - \frac{\nu I \langle \vec{s} \rangle}{2\mu_B} \right) = 2 \sum_i \mu_B \hat{\vec{s}}_i \cdot \vec{B}_{\text{eff}}, \quad (2.3)$$

mit dem effektiven Magnetfeld

$$\vec{B}_{\text{eff}} = \vec{B} - \frac{\nu I \langle \vec{s} \rangle}{2\mu_B} = \vec{B} + W \vec{M}. \quad (2.4)$$

Im letzten Schritt wurde  $\vec{B}_{\text{eff}}$  durch das anliegende Magnetfeld und das Produkt des Produkts der Magnetisierung  $\vec{B}$  und einer numerischen Konstante  $W$  ausgedrückt.

$H_{\text{eff}}$  entspricht nun einem System aus  $N$  unabhängigen Spins dessen kanonische Zustandssumme leicht zu bestimmen ist. Dazu wird die  $z$ -Achse in die Richtung von  $\vec{B}_{\text{eff}}$  gelegt und man erhält

$$Z(T, B, N) = \sum_{s_{z,1}=\pm 1/2} \cdots \sum_{s_{z,N}=\pm 1/2} \exp \left( -\beta \sum_{i=1}^N 2\mu_B B s_{z,i} \right), \quad (2.5)$$

$$= \prod_{i=1}^N \left[ \sum_{s_{z,i}=\pm 1/2} \exp(-2\beta\mu_B B s_{z,i}) \right], \quad (2.6)$$

$$= [2 \cosh(\beta\mu_B B)]^N. \quad (2.7)$$

Dabei ist  $\beta = 1/(k_B T)$ . Für die freie Energie des Systems erhält man damit

$$F(T, B, N) = -k_B T \ln Z(T, B, N) = -N k_B T \ln \cosh \left[ \frac{\mu_B B}{k_B T} \right], \quad (2.8)$$

woraus die Magnetisierung

$$M = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial F}{\partial B} \right)_{T,N} = n\mu_B \tanh(\beta\mu_B B_{\text{eff}}) = M_0 \tanh(\beta\mu_B(B + WM)) \quad (2.9)$$

folgt. Dies ist eine implizite Gleichung für  $M$ . Im Fall  $B = 0$  erhält man die spontane Magnetisierung

$$\frac{M_s}{M_0} = \tanh \left( \frac{T_c M_s}{T M_0} \right). \quad (2.10)$$

In Abbildung 1 ist zu sehen, dass die spontane Magnetisierung nicht immer verschwindet. Das System also auch ohne das anliegen eines Magnetfeldes magnetisch sein kann.

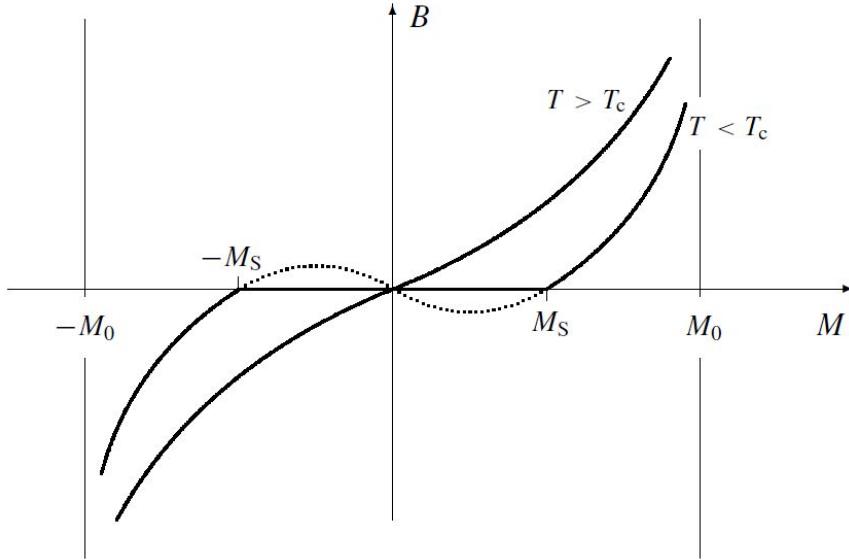


Abbildung 1: Das Magnetfeld als Funktion der Magnetisierung

Für  $M \ll M_0$  erhält man für das Magnetfeld  $B$

$$B = W \left( \frac{T}{T_c} - 1 \right) M + \frac{k_B T}{3\mu_B} \left( \frac{M}{M_0} \right)^3 + \mathcal{O} \left[ \left( \frac{M}{M_0} \right)^5 \right], \quad (2.11)$$

mit der kritischen Temperatur

$$k_B T_c = \mu_B^2 n W. \quad (2.12)$$

Dies gilt zum Beispiel für Temperaturen  $T \approx T_c$ . Insgesamt erhält man für die spontane Magnetisierung

$$M_s(T) \approx M_0 \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \sqrt{3(T_c - T)/T_c} & T \nearrow T_c \\ 1 - 2 \exp(-2T_c/T) & T \ll T_c \end{cases} \quad (2.13)$$

Oberhalb der kritischen Temperatur verschwindet die Magnetisierung, für  $T \approx T_c$  zeigt sie ein Potenzverhalten und für Temperaturen weit unterhalb der kritischen Temperatur nähert sie sich exponentiell ihrem Maximalwert. Für die magnetische Suszeptibilität gilt das Curie-Weiss-Gesetz

$$\chi_m = \left( \frac{\partial M}{\partial B} \right)_T \stackrel{B \rightarrow 0}{=} \frac{T_c/W}{T - T_c}, \quad T \geq T_c \quad (2.14)$$

### Freie Energie

Die freie Energie ist allgemein von der Form

$$dF = dF_0 - VMdB = dF_0 - Vd(MB) + VBdM \quad (2.15)$$

Dabei stellt  $F_0$  den mechanischen, also nicht magnetischen, Anteil der freien Energie dar. Integration liefert

$$F = F_0 - VBM + V \int B dM \quad (2.16)$$

Und durch Einsetzen von (2.11) erhält man

$$\mathcal{F}(T, B, M) = F_0(T) - VMB + \frac{VW}{2} \frac{T - T_c}{T_c} M^2 + \frac{Vk_B T}{12\mu_B} \frac{M^4}{M_0^3}, \quad (2.17)$$

$$= F_0(T) + V [a(T - T_c)M^2 + uM^4 - MB]. \quad (2.18)$$

Die numerischen Konstanten wurden zu  $a$  und  $u$  zusammengefasst. Im Gleichgewicht hängt die freie Energie nur von  $T$  und  $B$  ab<sup>1</sup>. Daher ist  $\mathcal{F}(T, B, M)$  ein Nicht-Gleichgewichtsausdruck für die freie Energie. Im Gleichgewicht ist die freie Energie minimal und es gilt

$$\mathcal{F} = \text{minimal} \rightarrow \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial M} \right)_{T, B} = 0 \rightarrow M = M(T, B), \quad (2.19)$$

woraus man dann die Magnetisierung im Gleichgewicht bestimmen kann.

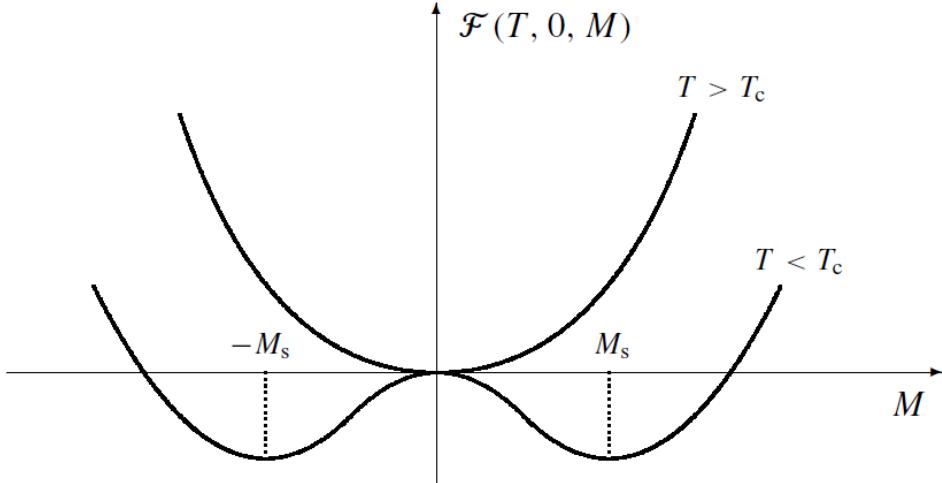


Abbildung 2: Die freie Energie als Funktion der Magnetisierung bei  $B = 0$  für verschiedene Temperaturen

In Abbildung 2 ist die freie Energie als Funktion der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen eingezeichnet. Für  $T > T_c$  hat die freie Energie ein eindeutiges Minimum bei  $M = 0$ . Für  $T < T_c$  hat die freie Energie die Form einer Doppelmulde. Es gibt nun zwei Minima die bei  $M = \pm M_s \neq 0$  liegen. D.h. durch den Vektor  $\vec{M}$  wird nun eine Richtung im Raum ausgezeichnet.

Während der Hamiltonoperator des Systems dreh-invariant ist, ist es die Lösung nicht mehr. Die Lösung von  $\mathcal{F} = \text{minimal}$  stellt also eine *spontane Symmetriebrechung* dar.

---

<sup>1</sup> Die Abhängigkeit vom Volumen wird hier und im Folgenden unterdrückt

### 3 Landau-Theorie

Im Rahmen der Landau-Theorie sollen nun die Ergebnisse aus der Betrachtung eines Ferromagneten auf beliebige Systeme verallgemeinert werden. Dazu wird die freie Energie nun analog zu (2.18) bis zur vierten Potenz in einer Taylorreihe der Ordnungsparameters  $\psi$  entwickelt,

$$\mathcal{F}(T, h, \psi) = F_0(T) + V [a(T)\psi^2 + u(T)\psi^4 - h\psi]. \quad (3.1)$$

$$(3.2)$$

Hier ist  $h$  ein beliebiges konstantes äußeres Feld und  $a(T)$  und  $u(T)$  zwei zunächst beliebige Funktionen. Beispiele für äußere Felder sind

$$h = \begin{cases} B & \text{Magnetfeld} \\ P - P_d & \text{Druck} \end{cases} \quad (3.3)$$

Die Entwicklung wurde nach der vierten Potenz abgebrochen, da  $\psi$  für  $T \approx T_c$  eine kleine Größe sein soll. Die freie Energie soll Invariant unter der Transformation  $(\psi, h) \rightarrow (-\psi, -h)$  sein, daher wurden Terme in  $\psi^3$  ausgeschlossen. Diese Symmetrieforderung ist für den allgemeinen Fall hier zwar willkürlich. Wenn man aber explizite Systeme betrachtet, etwa den Ferromagnetismus mit  $\psi = M$  und  $h = B$ , so ist diese Forderung sinnvoll und daher ist es plausibel die Symmetrie auch im Allgemeinen zu fordern. Da die freie Energie ihr globales Minimum annehmen soll, muss die höchste Potenz von  $\psi$  grade sein, was einen möglichen Term in  $\psi^5$  ausschließt. Die vernachlässigten Terme sind also von der Größenordnung  $\mathcal{O}(\psi^6)$ .

Der Ordnungsparameter stellt sich so ein, dass  $\mathcal{F}$  minimal wird. Daher werden im Folgenden zunächst die Minima von  $\mathcal{F}(\psi)$  für  $T > T_c$  und  $T < T_c$  bestimmt. Zur Vereinfachung sei  $h = 0$ .

Nach Voraussetzung (1.2) soll  $\psi$  für  $T > T_c$  verschwinden. Die Extremalbedingung

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \psi} = 2a(T)V\psi_0 + 4u(T)V\psi_0^3 \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.4)$$

wird dadurch erfüllt. Damit es sich tatsächlich um ein Minimum handelt, muss weiter

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \psi^2} = 2a(T)V + 12u(T)V\psi_0^2 \stackrel{\psi_0=0}{=} 2a(T)V > 0 \quad (3.5)$$

gelten. Daraus folgt die Bedingung

$$a(T) > 0 \text{ für } T > T_c. \quad (3.6)$$

Für  $T < T_c$  soll  $\psi_0 \neq 0$  sein. Aus der Extremalbedingung

$$\frac{1}{\psi_0} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \psi} = 2a(T)V + 4u(T)V\psi_0^2 \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.7)$$

folgt dann für den Gleichgewichtswert  $\psi_0$

$$\psi_0 = \pm \sqrt{-\frac{a(T)}{2u(T)}} \quad (3.8)$$

Die Minimalbedingung lautet

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \psi^2} = 2a(T)V + 12u(T)V\psi_0^2 > 0 \quad (3.9)$$

### 3 LANDAU-THEORIE

---

Aus der Differenz der Gleichungen (3.9) und (3.7) erhält man dann

$$8u(T)\psi_0^2 > 0, \quad (3.10)$$

woraus die Bedingung

$$u(T) > 0 \text{ für } T < T_c \quad (3.11)$$

für  $u(T)$  bei  $T < T_c$  folgt. Damit  $\psi_0$  reell ist, muss weiter

$$a(T) < 0 \text{ für } T < T_c \quad (3.12)$$

gelten. Die Funktion  $a(T)$  hat nach (3.6) und (3.12) bei  $T = T_c$  einen Vorzeichenwechsel. Da nur Temperaturen  $T \approx T_c$  betrachtet werden sollen, kann man  $a(T)$  in erster Näherung als

$$a(T) = a_0(T - T_c)$$

mit  $a_0 > 0$  ansetzen. Für  $T = T_c$  gilt nun aber

$$\left( \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \psi^2} \right)_{T=T_c} = \left( \frac{\partial^3 \mathcal{F}}{\partial \psi^3} \right)_{T=T_c} = 0 \quad (3.13)$$

Für ein Minimum der freien Energie bei  $T = T_c$  muss dann

$$\left( \frac{\partial^4 \mathcal{F}}{\partial \psi^4} \right)_{T=T_c} = 24u(T_c)V \stackrel{!}{>} 0 \quad (3.14)$$

gelten, woraus

$$u(T_c) > 0 \quad (3.15)$$

folgt. Da nur kleine Abweichungen um  $T_c$  betrachtet werden, lässt sich  $u(T)$  in erster Näherung als

$$u(T) = u_0 = \text{const} > 0. \quad (3.16)$$

schreiben.

Damit hat nun die freie Energie die gleiche Form

$$\mathcal{F}(T, h, \psi) = F_0(T) + V [a_0(T - T_c)\psi^2 + u_0\psi^4 - h\psi] \quad (3.17)$$

wie beim Ferromagnetismus (2.18). Bei der Herleitung wurden aber nur allgemeine Annahmen zum Verlauf des Ordnungsparameters gemacht, die garantieren, dass der Ordnungsparameter einen Phasenübergang beschreiben kann.

Für den Ordnungsparameter  $\psi_0$  im Gleichgewicht gilt für  $T \approx T_c$  und  $h = 0$

$$\psi_0 = \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ \sqrt{\frac{a_0}{2u_0}(T - T_c)} & T < T_c \end{cases} \quad (3.18)$$

Mit (1.4) lässt sich dann der Ordnungsparameter

$$\beta = \frac{1}{2} \quad (3.19)$$

ablesen. In Abbildung 3 ist der Verlauf des Ordnungsparameters eingezeichnet.

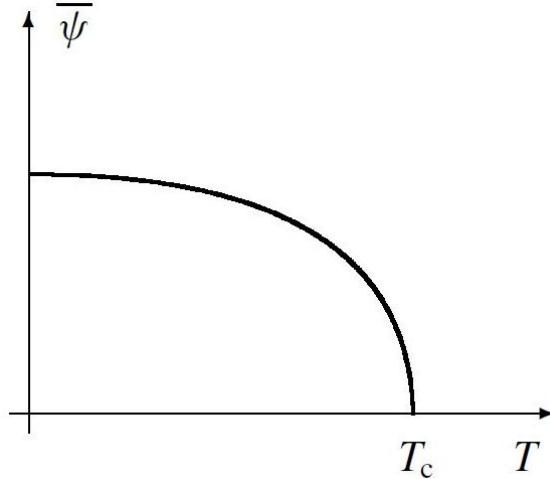


Abbildung 3: Der Verlauf der Ordnungsparameter im Gleichgewicht als Funktion der Temperatur

Die freie Energie im Gleichgewicht ist dann gegeben durch  $F(T, h) = \mathcal{F}(T, h, \psi_0)$ . Für  $h = 0$  bekommt man

$$F(T, 0) = \mathcal{F}(T, 0, \psi_0) = F_0(T) + \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ -\frac{Va_0^2}{4u_0}(T - T_c)^2 & T < T_c \end{cases} \quad (3.20)$$

$\mathcal{F}$  ist analytisch in allen Variablen<sup>2</sup>. Die Bedingung  $\mathcal{F} = \text{minimal}$  führt dann zu einem Sprung in  $\partial^2 \mathcal{F} / \partial T^2$  bei  $T = T_c$ . Die Landau-Theorie steht also im Einklang mit der Ehrenfest'schen Klassifizierung eines Phasenübergangs zweiter Ordnung.

## 4 Kritische Exponenten

Um die kritische Temperatur zeigen physikalische Größen  $F$  typischerweise ein Potenzverhalten,

$$F(t) \sim t^\varphi. \quad (4.1)$$

Dabei bezeichnet man  $\varphi$  als kritischen Exponenten und  $t = \frac{T - T_c}{T_c}$  als reduzierte Temperatur. Es existieren aber Ausnahmen von diesem Potenzverhalten. Die spezifische Wärme des Ising-Modells divergiert z.B. logarithmisch. Um diese Fälle zu berücksichtigen definiert man

$$\varphi := \lim_{t \searrow 0} \frac{\ln |F(t)|}{\ln(t)} \quad (4.2)$$

$$\varphi' := \lim_{t \nearrow 0} \frac{\ln |F(t)|}{\ln(-t)} \quad (4.3)$$

Hier werden die kritischen Exponenten  $\varphi$  und  $\varphi'$  auch danach unterschieden, ob man einen links- oder rechtsseitigen Grenzwert handelt. Im Allgemeinen können sich diese nämlich unterscheiden. Im Rahmen der Landau-Theorie ist das aber nicht der Fall.

<sup>2</sup>Alle Ableitungen sind stetig

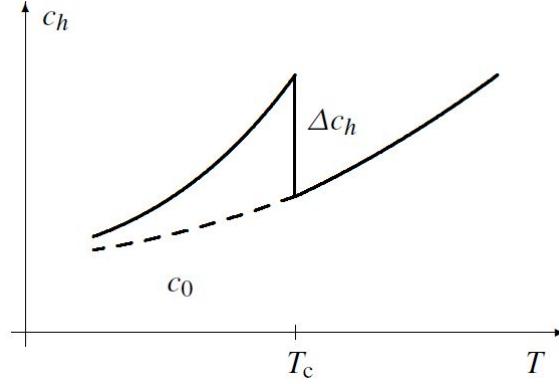


Abbildung 4: Die spezifische Wärme als Funktion der Temperatur

### Spezifische Wärme

Für die spezifische Wärme gilt bei  $h = const.$

$$C_h = T \frac{\partial S(T, h)}{\partial T} = T \frac{\partial S(T, h)}{\partial T} = -T \frac{\partial^2 F(T, h)}{\partial T^2} \quad (4.4)$$

Für  $h = 0$  erhält man dann aus (3.20)

$$C_h(T, 0) = C_0(T) + \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \frac{a_0^2}{2u_0} T & T < T_c \end{cases} \quad (4.5)$$

Mit (1.3) liest man dann den kritischen Exponenten

$$\alpha = \alpha' = 0 \quad (4.6)$$

ab. In Abbildung 4 ist die spezifische Wärme eingezeichnet. Bei  $T = T_c$  sieht man den für Phasenübergänge zweiter Ordnung charakteristischen Sprung.

### Suszeptibilität

Zur Bestimmung der Suszeptibilität  $\chi = \partial\psi/\partial h$  wird zunächst die Störung  $\psi = \psi_0 + \delta\psi$  berechnet, die ein schwaches konstantes Feld  $h$  hervorruft. Durch Einsetzen in freie Energie erhält man in erster Ordnung in  $\delta\psi$

$$\frac{1}{V} \frac{\partial \mathcal{F}(T, h, \psi)}{\partial \psi} = 2a_0(T - T_c)(\psi_0 + \delta\psi) + 4u_0(\psi_0 + \delta\psi)^3 - h \quad (4.7)$$

$$= \underbrace{[2a_0(T - T_c)\psi_0 + 4u_0\psi_0^3]}_{=0} + [2a(T - T_c) + 12u_0\psi_0^2]\delta\psi + \mathcal{O}(\delta\psi^2) - h = 0 \quad (4.8)$$

Durch Einsetzen von  $\psi_0$  aus (3.18) erhält man

$$\delta\psi_0 = \begin{cases} \frac{h}{2a_0|T-T_c|} & T > T_c \\ \frac{h}{4a_0|T-T_c|} & T < T_c \end{cases} \quad (4.9)$$

und damit die Suszeptibilität

$$\chi = \frac{\partial \psi}{\partial h} = \frac{\delta \psi_0}{h} = \begin{cases} \frac{1}{2a_0|T-T_c|} & T > T_c \\ \frac{1}{4a_0|T-T_c|} & T < T_c \end{cases}. \quad (4.10)$$

Der Vergleich mit (1.5) liefert den kritischen Exponenten

$$\gamma = \gamma' = 1. \quad (4.11)$$

In Abbildung 5 ist die Suszeptibilität  $\chi$  eingezeichnet. Bei  $T = T_c$  divergiert  $\chi$ . Für  $T \approx T_c$  können dann kleine Felder  $h$  große Störungen  $\delta\psi$  des Ordnungsparameters hervorrufen.

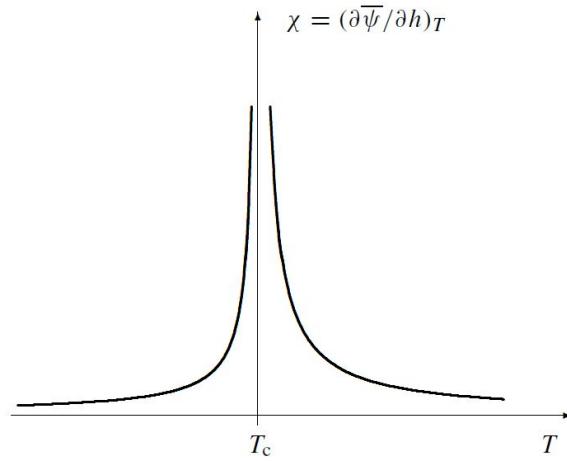


Abbildung 5: Die Suszeptibilität als Funktion der Temperatur

### $\psi$ - $h$ -Relation

Zur Berechnung der sog.  $\psi$ - $h$ -Relation sei  $T = T_c$  und  $h \neq 0$ . Darus folgt  $\psi_0 = 0$  und man bekommt aus (4.7)

$$\frac{1}{V} \frac{\partial \mathcal{F}(T_c, h, \psi)}{\partial \psi} = 4u_0(\delta\psi_0)^3 - h = 0 \quad (4.12)$$

Daraus folgt

$$\psi = \psi_0 + \delta\psi_0 = \delta\psi_0 = \left( \frac{h}{4u} \right)^{1/3}, \quad (4.13)$$

also

$$h = 4u_0\psi^3 \quad (4.14)$$

Mit (1.6) bekommt man dann den kritischen Exponenten

$$\delta = \delta' = 3. \quad (4.15)$$

## 5 Fluktuationen

Um die Korrelationslänge zu berechnen muss nun eine explizite Ortsabhängigkeit des Ordnungsparameters zugelassen werden,

$$\psi = \psi(\vec{r}). \quad (5.1)$$

Die Entwicklung der freien Energie wird dann zum Ginzburg-Landau-Ansatz

$$\mathcal{F}[\psi(\vec{r})] = \int [f_0(T) + A_0(\text{grad } \psi)^2 + a_0(T - T_c)\psi^2 + u_0\psi^4 - h\psi] d^3r \quad (5.2)$$

Die freie Energie  $\mathcal{F}[\psi(\vec{r})]$  ist nun ein Funktional in  $\psi(\vec{r})$  und die Bedingung für ein Minimum ist nun eine Funktionalableitung  $\delta\mathcal{F}[\psi(\vec{r})]/\delta\psi(\vec{r}) = 0$ . Man bekommt dann

$$2A_0\Delta\psi = 2a_0(T - T_c)\psi + 4u_0\psi^3 - h. \quad (5.3)$$

Es soll nun wieder die Suszeptibilität berechnet werden. Dazu sei das schwache, nun ortsabhängige, Feld  $h(\vec{r})$  gegeben durch

$$h(\vec{r}) = h_k \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (5.4)$$

Die Lösung sei von der Form

$$\psi_k = \psi_0 + \delta\psi_k \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (5.5)$$

wobei  $\psi_0$  die homogene Lösung für den Ordnungsparameter aus (3.18) ist und  $\delta\psi$  eine schwache Fluktuation des Ordnungsparameters, die durch  $h(\vec{r})$  hervorgerufen wird. In erster Ordnung in  $\delta\psi_k$  erhält man durch Einsetzen in (5.3)

$$\underbrace{2a_0(T - T_c)\psi_0 + 4u_0\psi_0^3}_{=0} + (2A_0k^2 + 2a_0(T - T_c) + 12u_0\psi_0^2) \delta\psi_k \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - h_k \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = 0 \quad (5.6)$$

Der erste Term verschwindet und es folgt

$$\chi_k = \frac{\delta\psi_k}{h_k} = \frac{1}{2A_0k^2 + 2a_0(T - T_c) + 12u_0\psi_0^2} \quad (5.7)$$

und durch Einsetzen von  $\psi_0$  aus (3.18) erhält man

$$\chi_k = \frac{\chi_{k=0}}{1 + k^2\xi^2} = \begin{cases} \frac{1}{2A_0k^2 + 2a_0|T - T_c|} & T > T_c \\ \frac{1}{2A_0k^2 + 4a_0|T - T_c|} & T < T_c \end{cases} \quad (5.8)$$

Dabei ist  $\chi_{k=0}$  die Suszeptibilität im homogenen Fall (4.10) und  $\xi$  die Korrelationslänge, die gegeben ist als

$$\xi = \begin{cases} \sqrt{\frac{A_0}{a|T - T_c|}} & T > T_c \\ \sqrt{\frac{A_0}{2a|T - T_c|}} & T < T_c \end{cases} \quad (5.9)$$

Der kritische Exponent der Korrelationslänge ist dann nach (1.7) gegeben durch

$$\nu = \nu' = \frac{1}{2} \quad (5.10)$$

### Bedeutung von $\xi$

Zur Interpretation von  $\xi$  werde ein bei  $\vec{r} = 0$  lokalisiertes Feld betrachtet,

$$h(\vec{r}) = h_0 \delta(\vec{r}) = h_0 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \int d^3k h_k \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (5.11)$$

Die hervorgerufene Fluktuation lautet dann

$$\delta\psi(\vec{r}) = \int d^3k \delta\psi_k \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \int d^3k \chi_k h_k \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (5.12)$$

$$= \frac{h_0 \chi_{k=0}}{(2\pi)^3} \int \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{1 + k^2 \xi^2} d^3k \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \quad (5.13)$$

Die Fluktuation fällt also auf der Länge  $\xi$  ab. Durch die äußere Störung wird aber keine Länge vorgegeben,  $\xi$  ist also eine charakteristische Länge des Systems. Aus (5.9) entnimmt man, dass die Korrelationslänge für  $T \rightarrow T_c$  divergiert. Für Temperaturen, die weit von  $T_c$  entfernt sind, ist  $\xi$  von der Größenordnung des mittleren Teilchenabstands. Damit lässt sich ein Phasenübergang folgendermaßen interpretieren.

Für  $T > T_c$  ist  $\psi_0 = 0$ . Im Fall des Ferromagnetismus hieße das, dass es keine spontane Magnetisierung gibt. Für die Fluktuationen gilt  $\delta\psi_0 \neq 0$  in einem Bereich der Größe  $\xi$ . Beim Ferromagnetismus können in diesem Bereich benachbarte Spins parallel ausgerichtet sein. Die einzelnen Bereiche haben aber unterschiedliche Ausrichtungen, so dass die gesamte Magnetisierung weiterhin verschwindet. Dass  $\xi \rightarrow \infty$  für  $T \searrow T_c$  gilt, bedeutet dann, dass die Bereiche mit Ordnung immer größer werden. Für  $T < T_c$  besteht bereits langreichweitige Ordnung. Die Fluktuationen stören hier die Ordnung.  $\xi \rightarrow \infty$  für  $T \nearrow T_c$  bedeutet dann, dass die Fluktuationen so stark werden, dass die Ordnung verschwindet.

## 6 Thermische Fluktuationen und Gültigkeit der Landau-Theorie

Nahe  $T_c$  ist  $\chi_k$  so groß, dass auch schwache Felder endlich Fluktuationen hervorrufen können. Diese Fluktuationen können dann auch thermisch angeregt werden, dass heißt ohne, dass ein äußeres Feld angelegt wird. Die Fluktuationen erstrecken sich dann über einen Raumbereich der Größe  $\xi$ . Die Stärke der Fluktuationen ist gegeben durch

$$\Delta\psi_{\text{therm}}^2 = \langle (\psi(\vec{r}) - \psi_0)^2 \rangle \quad (6.1)$$

Um diese Abschätzen zu können, wird zunächst das Funktional der freien Energie für  $h = 0$  um die homogene Lösung  $\psi_0$  entwickelt

$$\mathcal{F}[\psi(\vec{r})] = \mathcal{F}[\psi_0] + \int d^3r \frac{\delta\mathcal{F}[\psi_0]}{\delta\psi(\vec{r})} (\psi(\vec{r}) - \psi_0) \quad (6.2)$$

$$+ \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\delta^2\mathcal{F}[\psi_0]}{\delta\psi(\vec{r})\delta\psi(\vec{r}')} (\psi(\vec{r}) - \psi_0)(\psi(\vec{r}') - \psi_0) + \dots \quad (6.3)$$

Die Funktionalableitungen sind gegeben durch

$$\frac{\delta\mathcal{F}[\psi_0]}{\delta\psi(\vec{r})} = 2A_0\Delta\psi - 2a_0(T - T_c)\psi - 4u_0\psi^3 = 0, \quad (6.4)$$

$$\frac{\delta^2\mathcal{F}[\psi_0]}{\delta\psi(\vec{r})\delta\psi(\vec{r}')} = [2A_0\Delta - 2a_0(T - T_c) - 4u_0\psi^2(\vec{r})]\delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (6.5)$$

Daraus folgt die freie Energie

$$F[\psi(\vec{r})] = \mathcal{F}[\psi_0] + \frac{1}{2\chi} \int d^3r (\psi(\vec{r}) - \psi_0)^2 \quad (6.6)$$

und damit die Fluktuation der freien Energie

$$\Delta F = \frac{1}{2\chi} \int d^3r \langle (\psi(\vec{r}) - \psi_0)^2 \rangle \quad (6.7)$$

Man kann zeigen, dass die Fluktuationen eines Parameters zu einer Fluktuation der Entropie in der Größenordnung  $\Delta S \sim k_B$  führt [1]. Daraus folgt dann  $\Delta F \sim k_B T$ .

Weiter gilt, dass sich Ortsabhängige Fluktuationen über einen Raumbereich der Größe  $\xi$  erstrecken. Es gilt also

$$\langle (\psi(\vec{r}) - \psi_0)^2 \rangle = \begin{cases} \Delta\psi_{\text{therm}}^2 & \text{In einem Bereich der Größe } \xi^3 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.8)$$

Zusammengefasst gilt dann

$$\Delta F \sim \frac{\Delta\psi_{\text{therm}}^2 \xi^3}{\chi} \sim k_B T. \quad (6.9)$$

Für die weitere Diskussion lässt sich dieses Ergebnis auf  $d$  Dimensionen verallgemeinern, indem man  $\xi^3$  durch  $\xi^d$  ersetzt. Es folgt dann

$$\Delta\psi_{\text{therm}}^2 \sim \frac{\chi k_B T}{\xi^d} \sim \frac{k_B T}{A_0^{d/2}} |a_0(T - T_c)|^{d/2-1}. \quad (6.10)$$

Damit die Entwicklung der freien Energie bei  $(\text{grad } \psi)^2$  abgebrochen werden kann, müssen die thermischen Fluktuationen vernachlässigbar sein, da sonst höhere Ableitungen des Ordnungsparameters nicht vernachlässigt werden können und die Entwicklung nicht bei  $(\text{grad } \psi)^2$  abgebrochen werden kann. Dies ist der Fall, wenn die Fluktuationen viel kleiner als der Ordnungsparameter selbst sind

$$\Delta\psi_{\text{therm}}^2 \ll \psi_0^2 = \frac{a_0}{2u_0} |T - T_c|. \quad (6.11)$$

Daraus folgt durch einsetzen von (6.10) das Ginzburg-Kriterium

$$\frac{u_0}{A_0^{d/2}} k_B T |a_0(T - T_c)|^{d/2-2} \ll 1, \quad (6.12)$$

das eine Bedingung für die Gültigkeit der Theorie darstellt. Für  $d \leq 3$  ist die Bedingung bei  $T \rightarrow T_c$  immer verletzt, da der Exponent negativ ist. Für  $d = 4$  hängt es von den Vorfaktoren ab, ob das Kriterium erfüllt ist, da der Temperaturabhängige Term wegfällt und für  $d > 4$  ist die Bedingung für  $T \rightarrow T_c$  immer erfüllt, da der Exponent positiv ist. In der Tabelle 1 sind die Vorhersagen der Landau-Theorie für die kritischen Exponenten experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt. Man sieht, dass die Werte voneinander abweichen.

## 7 Zusammenfassung

Im Rahmen der Landau-Theorie wurde mittels einer einfachen Taylorentwicklung und einigen allgemeinen Annahmen ein universeller Ausdruck für die freie Energie gefunden, der mit der freien

## LITERATUR

---

Tabelle 1: Kritische Exponenten: Vergleich Theorie und Experiment

|            | $\alpha$ | $\beta$ | $\gamma$ | $\delta$ | $\nu$ |
|------------|----------|---------|----------|----------|-------|
| Theorie    | 0        | 1/2     | 1        | 3        | 1/2   |
| Experiment | 0        | 1/3     | 4/3      | 4.5      | 1/3   |

Energie beim Ferromagnetismus im Bereich der kritischen Temperatur in der Molekularfeldnäherung übereinstimmt. Ausgehend von diesem Ausdruck für die freie Energie lassen sich dann die kritischen Exponenten berechnen und darüber hinaus ein qualitatives Verständnis von Phasenübergängen gewinnen.

Es zeigt sich aber, dass die Landau-Theorie nur für  $d \geq 4$  Raumdimensionen gültig ist und, dass die Vorhersagen für die kritischen Exponenten sich nicht mit den Experimenten decken.

## Abbildungsverzeichnis

|   |  |   |
|---|--|---|
| 1 | Das Magnetfeld als Funktion der Magnetisierung . . . . .   | 3 |
| 2 | Die freie Enrgie als Funktion der Magnetisierung bei $B = 0$ für verschiedene Temperaturen . . . . . | 4 |
| 3 | Der Verlauf der Ordnungsparameters im Gleichgewicht als Funktion der Temperatur . . . . .            | 7 |
| 4 | Die spezifische Wärme als Funktion der Temperatur . . . . .  | 8 |
| 5 | Die Suszeptibilität als Funktion der Temperatur . . . . .  | 9 |

## Tabellenverzeichnis

|   |  |    |
|---|--|----|
| 1 | Kritische Exponenten: Vergleich Theorie und Experiment . . . . . | 13 |
|---|--|----|

## Literatur

- [1] Fließbach, T. „Statistische Physik: Lehrbuch zur Theoretischen Physik IV“. Spektrum Akademischer Verlag, 2010
- [2] Nolting, W. „Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik“. Springer, 2005