Statistische Mechanik

TU Berlin, WS 2014/2015

Prof. Dr. T. Brandes

6. Februar 2015

INHALTSVERZEICHNIS

1.	Klas	sische B	Beispiele für Phasenübergänge	1
	1.1	Einleit	ung	1
		1.1.1	Clausius-Clapeyron-Gleichung	2
		1.1.2	<i>p</i> - <i>V</i> -Diagramm, Potentiale bei Koexistenz flüssig-gasförmig	3
	1.2	Das va	an–der–Waals–Gas	3
		1.2.1	Die Zustandsgleichung	4
		1.2.2	Der kritische Punkt	5
		1.2.3	Kritische Exponenten	6
	1.3	Das Is	ing-Modell	8
		1.3.1	Mean-Field-Methode: Weiss'sche Molekularfeld-Näherung $\ .\ .\ .$	9
		1.3.2	Diskussion der Selbstkonsistenzgleichung	10
		1.3.3	Kritische Exponenten	12
		1.3.4	Mean-Field-Methode als 'falsche' Theorie	14
		1.3.5	Mean-Field-Lösung aus Variationsprinzip	15
2.	Feldt	theorien	in der statistischen Mechanik	19
	2.1	cal Electrolytes	19	
		2.1.1	Hubbard-Stratonovich Transformation	21
		2.1.2	Mean-Field Solution	22
		2.1.3	Poisson-Boltzmann Theory	24
		2.1.4	Single, charged membrane and solution with $M = 1$ ion type \ldots	26
	2.2	Landa	u–Theorie	28
		2.2.1	Das Ising–Modell als Feldtheorie	31
		2.2.2	Erste Analyse der Feldtheorie	32
		2.2.3	Landau-Funktional	33
	2.3	Gaußs	che Flukuationen	35
		2.3.1	Gaußsche Flukuationen im Ising–Modell	35
		2.3.2	Die Exponenten ν und η	38
		2.3.3	Die Korrelationsfunktion als Greensche Funktion	39
		2.3.4	Korrekturen zur freien Energie	41
		2.3.5	Die Divergenz der spezifischen Wärme	42
	2.4	Jenseit	ts von Mean–Field	44
		2.4.1	Das Ginsburg–Kriterium	44
		2.4.2	Scheitern der Störungstheorie für $T \to T_C$	46

		2.4.3	'Anomale Dimension' 46
3.	Skale	entransf	ormationen und Renormierungsgruppe
	3.1	Homog	genitätsannahme
		3.1.1	Skalengesetze
		3.1.2	Korrelationslänge und 'Hyperscaling'
	3.2	Repara	ametrisierungen
		3.2.1	Blockspins
		3.2.2	Approximation der neuen Wirkung
		3.2.3	Beispiel: Blockspins für das Isingmodell (1) 56
		3.2.4	Renormierte Parameter und Renormierungsgruppe
		3.2.5	Skalentransformation als dynamisches System
		3.2.6	Skalenrelationen 60
		3.2.7	Beispiel: Blockspins für das Isingmodell (2) 62
	3.3	Das G	außsche Modell
		3.3.1	Exakte Lösung 63
		3.3.2	Lösungs mittels Renormierungsgruppe
	3.4	Störun	gstheorie
		3.4.1	Das Wicksche Theorem. Diagramme
		3.4.2	RG-Fluss in niedrigster Ordnung
		3.4.3	RG-Fluss in zweiter Ordnung 71
4.	Kont	inuierlic	he Symmetrien
	4.1	Einfüh	rung
	4.2	Goldst	one-Moden
		4.2.1	Beispiel: Festkörper als elastische Medien
		4.2.2	Mermin–Wagner–Theorem
	4.3	Das X	<i>Y</i> -Modell
		4.3.1	Der Grenzfall hoher Temperaturen
		4.3.2	Der Grenzfall tiefer Temperaturen
		4.3.3	Wirbel, Berezinskii–Kosterlitz–Thouless–Übergang 79
	4.4	Herleit	ung des Coulomb-Gas-Modells
		4.4.1	Analyse des Coulomb-Gas-Modells
5.	Dissi	pation ι	und Nichtgleichgewicht
	5.1	Die Br	ownsche Bewegung
		5.1.1	Einstein-Relation
		5.1.2	Langevin-Gleichung
		5.1.3	Langevin-Gleichung und Diffusionsgleichung
	5.2	Kritisc	he Dynamik
		5.2.1	Zeitabhängige Landau–Ginzburg–Gleichung
		5.2.2	Relaxation, Modell A und Modell B 91
		5.2.3	Dynamischer kritischer Exponent z
		5.2.4	Skalierungsverhalten der Korrelationsfunktion

	5.3	Der K	ibble–Zurek–Mechanismus										
	5.4	Equilil	brierung eines makroskopischen Quantensystems										
		5.4.1	Zeitmittelung										
		5.4.2	Fluktuationen										
		5.4.3	Auflösungsgrenze bei Messungen 97										
		5.4.4	Zusammenhang mit mikrokanonischem Ensemble										
6.	Feyn	man-Ve	rnon Influence Functional Theories										
	6.1	uction, Motivation											
	6.2	Single	Path Integrals										
	6.3	Double	e Path Integrals										
	6.4	The In	fluence Functional										
6.5 Influence Functional for Coupling to Harmonic Oscillators													
		6.5.1	Time-evolution operator $U_B[q] \equiv U_B(t)$										
		6.5.2	Influence Phase										
		6.5.3	Linear Response, Fluctuation-Dissipation Theorem for $L(t)$ 107										
	6.6 Applications: Linear Coupling, Damped Harmonic Oscillator												
		6.6.1	Linear Coupling										
		6.6.2	Propagator for Damped Harmonic Oscillator										
	6.7	Anoth	er Look at Influence Functionals for General Baths										
		6.7.1	'Re-Exponentiation'										
	6.8	'Semic	lassical' Limit for Damped Single Particle Motion										
		6.8.1	Expansion of the Influence Phase										
		6.8.2	Completing the Square										
		6.8.3	Wigner Distribution in 'Semi-classical' Limit										
		6.8.4	Discussion										
		6.8.5	Linear Dissipation ('Ohmic Bath')										
		6.8.6	Application: Polaron-Transport										

Anhang

122

A.	Four A.1 A.2 A.3	ierraum-Methoden123Fourier-Reihen für Bravaisgitter-periodische Funktionen123Quadratische Form in Fourierdarstellung125Inverse und Spur einer Matrix im Fourierraum125
В.	Gauß	Sintegral
	B.1	Integrale
	B.2	Korrelationsfunktion
	B.3	Fourierdarstellung für G_{ij}
	B.4	Wicksches Theorem

C.	Funk	tionalableitung	•	•									•				129
	C.1	Variationsableitungen	•	•									•				129
	C.2	'Physiker-Notation'		•									•				130

1. KLASSISCHE BEISPIELE FÜR PHASENÜBERGÄNGE



Fig. 1.1: (aus N. Straumann, 'Thermodynamik'). LINKS: Entropiefläche für Wasser als Beispiel für einen 'einfachen Stoff'. RECHTS: Entsprechendes *p*–*T*–Diagramm.

1.1 Einleitung

Die Thermodynamik eines einfachen Stoffes wird durch die Entropie S(U, V, N) als Funktion ihrer natürlichen Variablen (Energie, Volumen, Teilchenzahl) beschrieben (SKRIPT THERMODYNAMIK). Im Gleichgewicht muss Stabilität herrschen (deshalb ist S konkav). Es kann vorkommen, dass die Entropiefläche S(U, V, N) flache Stücke enthält, was immer noch konsistent mit der Konkavität ist. In solchen Fällen können thermodynamische Größen unstetig werden (z.B. das Volumen als Funktion des Drucks bei konstanter Temperatur). Experimentell stellt sich heraus, dass man es dann mit der Koexistenz mehrerer **Phasen** des Stoffes zu tun hat.

Experimenteller Befund (Beispiel, vgl. SOMMERFELD Paragraph 16): Ein mit Wasser gefüllter Zylinder im Wärmebad mit konstanter Temperatur T, anfangs Kolben auf Wasseroberfläche. Wir vergrößern das Volumen durch Hochziehen des Kolbens: das führt zu Aufspalten in zwei Phasen (Wasser und Wasserdampf), so dass der Druck p unabhängig vom Volumen V konstant bleibt. Wenn wir das Volumen sehr stark vergrößern wird alles zu Wasserdampf, der dann weiter expandiert wird. Wenn wir umgekehrt das Volumen sehr stark verkleinern, wird alles zu Wasser, das dann weiter komprimiert wird.

Die flachen Stücken der Entropiefläche werden deshalb als Gemische von mehreren koexistierenden Phasen interpretiert (STRAUMANN): z.B. drei Phasen am sogenannten

Tripelpunkt im p-T-Phasendiagramm, bzw. zwei Phasen auf den jeweiligen Koexistenz-Kurven (z.B. der Dampfdruckkurve). Beim Überqueren der Dampfdruckkurve im p-T-Diagramm findet der Übergang (reines Wasser - Gemisch - reiner Wasserdampf) statt; er wird als **Phasenübergang 1. Ordnung** bezeichnet.

Wir erkennen weiterhin, dass die Dampfdruckkurve (im Gegensatz zur Schmelzkurve) im p-T-Diagramm an einem kritischen Punkt p_c, T_c terminiert (entspricht dem Scheitel der Parabel in Fig. 1.1 links): Oberhalb der Temperatur T_c gibt es keine Phasenübergänge 1. Ordnung mehr, d.h. auch keine Gemische koexistierender Phasen.

Im p-T-Diagramm kann man kontinuierlich von 'Wasser' (Fluid) zu 'Dampf' (Gas) gehen, aber nicht von 'Eis' zu 'Wasser' oder von 'Eis' zu 'Dampf'. (GOLDENFELD) Der Grund hierfür ist letztlich die Translationssymmetrie, die Fluid und Gas beide gemeinsam haben, während sie im kristallinen Festkörper ('Eis') nicht vorhanden ist.

FRAGE: Gibt es Modelle, die flache Stücke in thermodynamischen Potentialen und damit Phasenübergänge 1. Ordnung für einen einfachen Stoff mikroskopisch aus einer Zustandssumme ableiten?

1.1.1 Clausius-Clapeyron-Gleichung

Die Clausius-Clapeyron-Gleichung ist einer der frühen Erfolge der Thermodynamik und ein 'Grundpfeiler der Wärmelehre und der physikalischen Chemie' (BECKER). Wir wollen die Kurve p(T) im *p*-*T*-Diagramm finden, deren Punkte den Phasenübergängen 1. Ordnung, d.h. den horizontalen Abschnitte im *p*-*V*-Diagramm (Koexistenz flüssiggasförmig) entspricht.

Herleitung (BECKER): Wir betrachten das 'System Fluid–Gas' als Carnot-Maschine (reversible Dampfmaschine!) im p-V Diagramm auf horizontaler Abschnitte zwischen V_2 (vollständig flüssige Phase) und V_1 (vollständig gasförmige Phase): isotherme Expansion bei T, **Verdampfungswärme** Q zufügen. Adiabatische Expansion auf T - dT. Isotherme Kompression bei T-dT, dann wieder adiabatische Kompression zum Ausgangspunkt. Deshalb mit Carnot-Wirkungsgrad η , dT klein gegenüber T,

$$\eta = 1 - \frac{T - dT}{T} = \frac{A}{Q} = \frac{(V_1 - V_2)dp}{Q}, \qquad (1.1)$$

was schließlich auf

$$\frac{dp}{dT} = \frac{Q}{(V_1 - V_2)T}, \quad \text{Clausius-Clapeyron-Gleichung} \quad (1.2)$$

führt.

Wir finden nun eine Näherungslösung durch die Annahme $Q = \text{const}, V_1 - V_2 \approx V =$ Volumen der gasförmigen Phase, die als ideal ($pV = Nk_BT$) angenommen wird. Dann

$$\frac{dp}{dT} = \frac{Q}{VT^2} = \frac{Qp}{Nk_BT^2} \rightsquigarrow p(T) = p_0 e^{-\frac{Q}{Nk_BT}}.$$
(1.3)



Fig. 1.2: (Stanley, 'Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena', Fig. 2.5)

1.1.2 *p*-V-Diagramm, Potentiale bei Koexistenz flüssig-gasförmig

Aus den experimentellen Befunden folgt weiterhin die Existenz horizontaler Abschnitte im *p*-V-Diagramm mit den entsprechenden Konsequenzen (z. B. Figure 1.2, aus STAN-LEY 'Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena'): lineares Stück in der freien Energie F(V), Knick im Gibbs-Potential G(p), Sprung im V-*p*-Diagramm. Im *p*-V-Diagramm hören die horizontalen Abschnitte oberhalb einer kritischen Temperatur T_c auf (entspricht dem kritischen Punkt p_c, T_c im p-T-Diagramm). Der Übergang (Existenz horizontaler Abschnitte - Nichtexistenz horizontaler Abschnitte) wird als **Kontinuierlicher Phasenübergang (kritisches Phänomen)**¹ bezeichnet. Kritische Phänomene gehören mit zum Interessantesten, was die Physik zu bieten hat.

AUFGABE: Herleitung der Clausius-Clapeyron-Gleichung aus den horizontalen p(V)-Abschnitten im p-V-Diagramm und dem entsprechenden linearen Teil der freien Energie F(V,T). Hinweis: Verdampfungswärme Q als $T\Delta S$, (ΔS Entropiedifferenz) ausdrücken.

1.2 Das van-der-Waals-Gas

(SKRIPT THERMODYNAMIK) Das van-der-Waals-Gas ist ein früher Erfolg (1873, Doktorarbeit von van-der-Waals) einer phänomenologischen Theorie mit zwei Parametern (a und b), die (nach etwas Modifikation, s.u.) Phasenübergänge tausender von Systemen (gasförmig/flüssig) beschreibt. Als frühes 'Highlight' der theoretischen Physik ist diese Theorie bedeutend als eine Theorie der 'realen' Gase sowie als Beispiel für eine 'universelle Theorie', die ohne 'wildes Herumfitten' eine ganze Klasse von Materialsystemen beschreibt ('Gesetz der korrespondierenden Zustände'). Als Theorie erklärt sie ein

 $^{^1}$ Manchmal auch als Phasenübergang zweiter Ordnung bezeichnet, was z.B. von GOLDENFELD als veraltete Terminologie bezeichnet wird

sogenanntes 'kritisches Phänomen', d.h. eine Singularität in der Zustandssumme. Wie sich herausstellen wird, hat sie Schwachstellen z.B. in der Form falscher (mean-field) 'kritischer Exponenten'.

1.2.1 Die Zustandsgleichung

Der Ausgangspunkt ist eine gegenüber dem idealen Gas modifizierte Zustandsgleichung,

$$\left(p+a\frac{N^2}{V^2}\right)(V-Nb) = Nk_BT \tag{1.4}$$

mit Konstanten a > 0, b > 0. Phänomenologisch ist Nb das durch die endliche Molekülgröße ausgeschlossene Volumen, und der 'Effektiv'-Druck im Innern ist größer als Druck auf die Wand (Moleküle werden durch attraktive, langreichweitige Wechselwirkungen ins Innere gezogen), deshalb spricht man von einem 'Kohäsionsterm' $a_{V2}^{N^2} > 0$.

(NOLTING) Die Herleitung erfolgt über das Ersetzen des Vielteilchen-Wechselwirkungspotentials zwischen den Molekülen (z.B. Lennard-Jones) durch ein effektives mittleres Einteilchenpotential, z. B. $V(r < r_0) = \infty$ und $V(r > r_0) = -V_0 < 0$ mit abstoßendem 'hard-core' und einem anziehenden Term für größere Abstände. Dies führt in der kanonischen Zustandssumme Z(N, V, T) zu einer einfachen Modifikation (im Vergleich zur Zustandssumme des idealen Gases), und damit zur van-der-Waals-Gleichung.

Instabile Bereiche im p-V-Diagramm (negative Kompressibilität) verletzen die thermodynamische Stabilitätsbedingung: Dort versagt die van-der-Waalssche Zustandsgleichung. In diesem Bereich wird die freie Energie F(T, V) konkav im Volumen V im Widerspruch zum Minimalprinzip für F. Weiterhin wird das Gibbs-Potential G(T, p) mehrdeutig in p im Widerspruch zur Eindeutigkeit einer Funktion. Die Mehrdeutigkeit von G(T, p) im instabilen Bereich läßt sich auf die Mehrdeutigkeit von V(p) zurückführen (vg. CALLEN). Allgemein kann für solche Instabilitäten ein Zusammenhang mit der Katastrophentheorie hergestellt werden, der über die Thermodynamik und Statistik hinausgeht.

Um trotz dieser Probleme thermodynamisch konsistent zu bleiben, wird eine Modifikation der Zustandsgleichung im instabilen Bereich ausgeführt, die auf Maxwell zurückgeht. Dadurch wird eine thermodynamisch gültige Beschreibung im gesamten p-V-Diagramm möglich Die Idee dabie ist, dass die so modifizierte van-der-Waalssche Zustandsgleichung dann einen *Phasenübergang* zwischen flüssiger und gasförmiger Phase eines Fluids beschreiben kann. Hierfür gibt es zwei mögliche Vorgehensweisen:

- 1. Ersetze die freie Energie F(V,T) durch ihre konvexe Hülle, d.h. Stützgeraden von unten zwischen V_2 und V_1 an die Kurve F(V, T = const) im instabilen Bereich. Im p-V-Diagramm wird ein Teil der p(V)-Kurven dann durch eine Gerade (Maxwell-Gerade, siehe Bild).
- 2. Ersetze ein mehrdeutiges Gibbs-Potential G(T, p) durch den jeweils kleinsten Zweig im Einklang mit Minimalprinzip für G(T, p). Dann hat G(T, p) für festes T einen Knick bei einem bestimmten Druck p (Bild).

Mit der ersten Methode folgt für die horizontalen Stücke im p-V-Diagramm

$$p(V_1 - V_2) = F_2 - F_1 = \int_1^2 dF = -\int_1^2 p dV$$
(1.5)

In der geometrischen Interpretation separiert die Maxwell-Gerade die ursprüngliche vander-Waals-Kurve so, daß die Flächen oben und unten gleich sind.

1.2.2 Der kritische Punkt

Im p-V-Diagramm (SKIZZE in VL) existiert ein **kritischer Punkt** (p_c, V_c, T_c) , der durch

$$(-V\kappa_T)^{-1} \equiv \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T=T_c} = 0, \quad \frac{\partial^2 p}{\partial V^2} \left| T = T_c = 0 \right.$$
(1.6)

charakterisiert ist. Dies folgt z.B. auch aus der Analyse der kubischen Gleichung (1.4), siehe z.B. NOLTING. Man findet durch Rechnung für das van-der-Waals-Gas

$$p_c = \frac{a}{27b^2}, \quad V_c = 3bN, \quad k_B T_c = \frac{8a}{27b}.$$
 (1.7)

Eine Kombination der obigen Parameter ist

$$Z_c \equiv \frac{p_c V_c}{T_c} = \frac{3}{8} = 0.375, \text{ v.-d.-Waals Gas}$$
 (1.8)

$$=$$
 1, ideales Gas. (1.9)

Wegen $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T=T_c} = 0$ ist am kritischen Punkt bei der *kritischen Temperatur* T_c

$$\kappa_T = \infty, \quad T = T_c, \tag{1.10}$$

d.h. die isotherme Kompressibilität divergiert am kritischen Punkt. Aus der statistischen Mechanik der großkanonischen Zustandssumme (SKRIPT THERMODYNAMIK) wissen wir andererseits, dass sich κ_T durch die thermischen Fluktuationen der Teilchenzahl N im großkanonischen Ensemble ausdrücken lässt:

$$\kappa_T = \frac{V}{k_B T \langle N \rangle^2} \left(\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \right). \tag{1.11}$$

Das bedeutet also, dass die Fluktuationen der Teilchenzahl N am kritischen Punkt divergiert. Experimentell beobachtbar ist das bei der Streuung von Licht an divergierenden Dichtefluktuationen als *kritische Opaleszenz* (STANLEY).

Für $T > T_c$ gibt es darüber hinaus keine Instabilitäten (keine Maxwell-Geraden) und deshalb überhaupt keine Phasenübergänge 1. Ordnung mehr zwischen den zwei Phasen (flüssig und gasförmig). Es gibt also keine Trennfläche mehr zwischen zwei verschiedenen Bereichen des Fluids, während sich für $T < T_c$ diese Bereiche durch ihre Dichtedifferenz $\rho_{\rm fl} - \rho_{\rm g}$ unterscheiden. Diese Dichtedifferenz verschwindet also für $T > T_c$, ist endlich für $T < T_c$, und wird deshalb als **Ordungsparameter** bezeichnet. An der kritischen Temperatur tritt ein *Phasenübergang 2. Ordnung* ein. Wir definieren allgemein: **Definition** Ein **Ordungsparameter** ist eine Funktion von thermodynamischen Variablen f(T, ...), die für alle Temperaturen oberhalb einer kritischen Temperatur T_c verschwindet, $f(T \ge T_c, ...) = 0$.

Die kritischen Werte (p_c, V_c, T_c) charakterisieren das Fluid und folgen 'mikroskopisch' aus den Parametern *a* und *b*, Gl. (1.7). Das legt die Einführung dimensionsloser Parameter nahe;

$$p/p_c = \tilde{P}, \quad V/V_c = \tilde{V}, \quad T/T_c = \tilde{T},$$

$$(1.12)$$

in denen sich die Zustandsgleichung schreibt als

$$(\tilde{P}+3/\tilde{V}^2)(3\tilde{V}-1) = 8\tilde{T}$$
, Gesetz der korrespondierenden Zustände . (1.13)

In Einheiten der kritischen Parameter p_c etc. haben alle van-der-Waals-Gase also die gleiche Zustandsgleichung, unabhängig vom Wert der Parameter a und b (Fluide mit denselben Werten \tilde{P} , \tilde{V} und \tilde{T} sind in 'korrespondierenden Zuständen'). Das ist die oben erwähnte 'Universalität' der van-der-Waals-Theorie.

1.2.3 Kritische Exponenten

Am kritischen Punkt divergiert die isotherme Kompressibilität, Gl. (1.10). Was in der Nähe dieser Divergenz passiert, ist ein wesentlicher Bestandteil der 'Theorie der kritischen Phänomene' bzw. Phasenübergänge.

Wie bei mathematischen Funktionen wie z.B. $f(x) = 1/x^2$ werden solche Divergenzen durch sogenannte kritische Exponenten beschrieben. Diese beschreiben das Verhalten eines thermodynamischen Systems in der Nähe der kritischen Temperatur, d.h. für kleine

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}.$$
 (1.14)

Exponenten sind wichtig für den Vergleich zwischen Experiment und Theorie: häufig sind sie nicht von Details eines Systems bestimmt, sondern nur von generellen Eigenschaften wie der System–Dimension und bestimmter Symmetrien. Diese 'Universalität' ermöglicht es, Äquivalenzklassen ('Universalitätsklassen') mikroskopisch sehr unterschiedlicher physikalischer Systeme zu definieren, die bezüglich ihres kritischen Verhaltens äquivalent sind und z.B. dieselben kritischen Exponenten liefern. Die Gründe hierfür sind tiefliegend und werden im Rahmen der Theorie der kritischen Phänomene (Skalenhypothese, Renormierungsgruppen-Theorie) untersucht.

Die kritische Exponenten des van-der-Waals-Gases können aus der Zustandsgleichung $(P/P_c + 3/V/V_c^2)(3V/V_c - 1) = 8T/T_c$, Gl. (1.13), gewonnen werden. Dazu führt man neue Variablen in der Nähe des kritischen Punktes ein,

$$p' \equiv P/P_c - 1, \quad v \equiv V/V_c - 1, \quad t \equiv T/T_c - 1.$$
 (1.15)

Im folgenden schreiben wir p statt p'. Dann haben wir

$$(p+1+3/(v+1)^2)(3v+2) = 8(t+1).$$
(1.16)

Wichtig ist hierbei das Auftreten der **Bifurkation** bei $T < T_c$ im p-V Diagramm (SKIZ-ZE), d.h. das Aufspalten in zwei unterschiedliche Phasen (flüssig/gasförmig). Für $T > T_c$ sind die folgenden Exponenten entlang der van-der-Waals p(V)-Kurve zu berechnen. Für $T < T_c$ sind sie entlang der zwei Bifurkations-Zweige zu berechnen (BILD, vgl. auch NOLTING), und für $T = T_c$ entlang der kritischen Isotherme.

Kritische Isotherme, Exponent δ

Dieser Exponent ist definiert über

$$p = \mathcal{D}|(\rho - \rho_c)/\rho_c|^{\delta} \operatorname{sgn}((\rho - \rho_c)) \quad T = T_c, \quad v \to 0, p \to 0,$$
(1.17)

beschreibt dieser Exponent das Verhalten der kritischen Isotherme in der Nähe von (V_c, p_c) . Üblicherweise benutzt man hier die Dichtedifferenz $(\rho - \rho_c)/\rho_c$, vgl. STANLEY, die man aber in die Volumenänderung umrechnen kann,

$$\rho - \rho_c \propto \frac{1}{V} - \frac{1}{V_c} \propto \frac{1}{\tilde{V}} - 1 = \frac{1}{v+1} - 1 = -v + O(v^2).$$
(1.18)

Für $T = T_c$ können wir die van-der-Waals-Gleichung ohne Maxwell-Konstruktion verwenden. Durch Entwickeln findet man (NACHPRÜFEN!)

$$p = -\frac{3}{2}v^3 + O(v^4),$$
 Exponent $\delta = 3,$ (1.19)

was bereits wegen der kubischen Form der van-der-Waals-Kurven zu erwarten war.

Kompressibilität, Exponenten γ , γ'

Dieser Exponent ist definiert über (vgl. STANLEY)

$$\kappa_T / \kappa_T^{\text{id}} \equiv \begin{cases} \mathcal{C}'(-t)^{-\gamma'}(1+\ldots) & T < T_c \\ \mathcal{C}t^{-\gamma}(1+\ldots) & T > T_c, V = V_c \end{cases}$$
(1.20)

mit der isothermen Kompressibilität des idealen Gases bei $(p, T, V) = (p_c, T_c, V_c)$,

$$\kappa_T^{\rm id} \equiv \frac{1}{p_c}.\tag{1.21}$$

Für $T>T_c$ können wir wieder die van-der-Waals-Gleichung ohne Maxwell-Konstruktion verwenden. Dann ist

$$\tilde{P} = 8\tilde{T}/(3\tilde{V}-1) - 3/\tilde{V}^2, \quad \left(\frac{\partial\tilde{p}}{\partial\tilde{V}}\right)_{\tilde{T}}\Big|_{\tilde{V}=1} = -24\tilde{T}/4 + 6$$

$$\kappa_T \equiv -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T, \quad \kappa_T/\kappa_T^{\text{id}} = \frac{1}{6(\tilde{T}-1)} = t^{-1}, \quad \text{Exponent } \gamma = 1. \quad (1.22)$$

Ordnungsparameter $\rho_{\rm fl} - \rho_{\rm g}$, Exponent β

Dieser Exponent ist definiert über

$$\rho_{\rm fl} - \rho_{\rm g} = \mathcal{B}t^{\beta}, \quad t \to 0^-. \tag{1.23}$$

Die Berechnung hier ist etwas komplizierter, da man jetzt unterhalb T_c ist und im Prinzip die Maxwell-Konstruktion durchführen muß. Man kann aber wieder um kleine Abweichungen um den kritischen Punkt (p_c, T_c, V_c) herum entwickeln und findet (AUFGABE)

Exponent
$$\beta = 1/2$$
. (1.24)

Spezifische Wärme, Exponenten α , α'

Dieser Exponent ist definiert über (vgl. STANLEY)

$$C_V \equiv \begin{cases} \mathcal{A}'(-t)^{-\alpha'}(1+...) & T < T_c \\ \mathcal{A}t^{-\alpha}(1+...) & T > T_c, V = V_c \end{cases}$$
(1.25)

Für $T>T_c$ können wir wieder die van
–der–Waals–Gleichung ohne Maxwell-Konstruktion verwenden. Dann ist

Exponent
$$\alpha = \alpha' = 0.$$
 (1.26)

Wir fassen unsere Ergebnisse zusammen;

$$\alpha = \alpha' = 0, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = 1, \quad \delta = 3.$$
 (1.27)

1.3 Das Ising-Modell

Als zweites System betrachten wir wir ein Modell für den Phasenübergang in magnetischen Systemen, wo eine ferromagnetische Phase $T < T_c$ von einer paramagnetischen Phase $T > T_c$ unterschieden wird.

Das Ising-Modell beschreibt N Freiheitsgrade (Spins) $\sigma_i = \pm 1$ auf den Plätzen i eines d-dimensionalen Gitters, wobei $\sigma_i = \pm 1$ den Eigenwerten der z-Komponente des Spin-1/2-Operators entspricht. Die Spins wechselwirken miteinander über eine **Aus**tauschwechselwirkung J_{ij} und mit einem Magnetfeld h_i am Platz i. Der Hamiltonian ist definiert als

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \frac{1}{2} g \mu_B \sum_i h_i \sigma_i, \quad J_{ij} = J_{ji}.$$
 (1.28)

Die Matrix J_{ij} ist hier noch beliebig, wird aber meist durch eine Konstante J und eine Summation über *nächste Nachbarn* (benachbarte Gitterplätze i) ersetzt, und man schreibt häufig

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \frac{1}{2} g \mu_B \sum_i h_i \sigma_i$$
(1.29)

mit dem Symbol $\langle ij \rangle$ für die Summation über nächste Nachbarn, wobei im Vergleich mit Gl. (1.28) der Faktor $\frac{1}{2}$ entfällt. Im Folgenden setzen wir das Produkt aus g (Lande-Faktor) und μ_B (Bohr-Magneton) der Einfachheit halber gleich eins.

Die kanonische Zustandssumme des Isingmodells

$$e^{-\beta F} = Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{-\beta H}$$
 (1.30)

lässt sich bis auf wenige Ausnahmen nicht exakt berechnen. Man beginnt am besten mit Näherungsmethoden, von denen man auch insgesamt mehr über kritische Phänomene lernt als nur aus exakten Lösungen.

1.3.1 Mean-Field-Methode: Weiss'sche Molekularfeld-Näherung

Für $J_{ij} = 0$ hat man nichtwechselwirkende Spins und das Modell ist exakt lösbar. Für $J_{ij} \neq 0$ nehmen wir jetzt an, dass wir den Effekt der Spin-Spin-Wechselwirkungen durch ein **effektives Magnetfeld** h_i^{eff} beschreiben können, das zusätzlich den Einfluss aller Spins auf einen gegebenen festen Spin *i* beschreibt. Man schreibt den Hamiltonian hierzu zunächst exakt um als

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(\delta \sigma_i + \langle \sigma_i \rangle \right) \left(\delta \sigma_j + \langle \sigma_j \rangle \right) - \sum_i h_i \sigma_i, \quad \delta \sigma_i \equiv \sigma_i - \langle \sigma_i \rangle$$
$$= -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(\delta \sigma_i \delta \sigma_j + \delta \sigma_j \langle \sigma_i \rangle + \delta \sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \right) - \sum_i h_i \sigma_i$$
$$= -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \left(\delta \sigma_i \delta \sigma_j + \sigma_j \langle \sigma_i \rangle + \sigma_i \langle \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \right) - \sum_i h_i \sigma_i$$
$$\equiv H^{\rm MF} - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \delta \sigma_i \delta \sigma_j \qquad (1.31)$$

mit dem Mean-Field-Hamiltonian

$$H^{\rm MF} = -\sum_{i} h_i^{\rm eff} \sigma_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle, \quad h_i^{\rm eff} \equiv h_i + \sum_{j} J_{ij} \langle \sigma_j \rangle.$$
(1.32)

Das ist zunächst nichts weiter als eine exakte Umschreibung des Hamiltonians, wobei $m_i \equiv +\langle \sigma_i \rangle$ Mittelwerte bezüglich einer noch nicht definierten Verteilung sind. Sind nun die Flukuationsterme, $\delta \sigma_i \delta \sigma_j$, 'klein', so liegt es nahe, den vollen Hamiltonian H durch den Mean-Field-Hamiltonian H^{MF} zu ersetzen.

Entsprechend werden nun die Mittelwerte $\langle \sigma_i \rangle$ mit der kanonischen Verteilung bezüglich dieses neuen Mean-Field-Hamiltonians berechnet, d.h.

$$\langle \sigma_j \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \sigma_j e^{-\beta H^{\rm MF}}.$$
 (1.33)

Im Vergleich zum exakten Hamiltonian fehlen im Mean-Field-Hamiltonian also die **Fluk-**tuationsterme

$$\delta \sigma_i \delta \sigma_j.$$
 (1.34)

Der Term $\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$ in H^{MF} ist eine Konstante und geht deshalb in die Dichtematrix selbst nicht ein. Er beschreibt eine Verschiebung der Grundzustandsenergie. Der Mean-Field-Hamiltonian beschreibt unabhängige Spins, wobei sich jeder Spin in einem effektiven, durch die anderen Spins erzeugten Magnetfeld h_i^{eff} befindet,das selbst wieder von den Mittelwerten $\langle \sigma_j \rangle$ abhängt und deshalb **selbstkonsistent** ausgerechnet werden muss.

Wir nehmen jetzt ein homogenes äusseres Magnetfeld und eine homogene Magnetisierung an,

$$h_i = h, \quad \langle \sigma_j \rangle = m, \quad \text{unabhängig vom Gitterplatz } i.$$
 (1.35)

Dann kann alles einfach gelöst werden:

$$m = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \sigma_j e^{-\beta H^{\rm MF}} = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \sigma_1 e^{\beta \sum_i h^{\rm eff} \sigma_i} \qquad (1.36)$$

$$= \frac{\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sigma_1 e^{\beta h^{\text{eff}} \sigma_1}}{\sum_{\sigma_1=\pm 1} e^{\beta h^{\text{eff}} \sigma_1}} = \frac{\sinh \beta h^{\text{eff}}}{\cosh \beta h^{\text{eff}}} = \tanh \left[\beta (h + \sum_j J_{1j}m)\right]. \quad (1.37)$$

Die Magnetisierung $\langle \sigma_j \rangle = m$ folgt also aus der Selbstkonsistenzgleichung

$$m = \tanh \left[\beta(h + \mathcal{J}m)\right], \quad \mathcal{J} \equiv \sum_{j} J_{1j}. \quad (1.38)$$

Die Selbstkonsistenzgleichung kann graphisch oder numerisch gelöst werden (s.u.), womit z.B. die Bedingungen für die Existenz eines Phasenübergang und die kritische Temperatur im Rahmen dieser **Mean-Field-Näherung** einfach hergeleitet werden können.

1.3.2 Diskussion der Selbstkonsistenzgleichung

Zunächst hat man für den trivialen Spezialfall $\mathcal{J} = 0$, d.h. ohne Spin-Spin-Wechselwirkungen,

$$m = \tanh[\beta h], \quad \text{Paramagnet}, \quad (1.39)$$

d.h. die Spins sind unabhängig. Insbesondere gibt es nur für endliches $m \neq 0$ eine endliche Magnetisierung, und man spricht von einem Paramagneten. Dieses Ergebnis bekommt man natürlich auch sofort aus

$$e^{-F_{\text{free}}} = Z_{\text{free}} = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\beta \sum_i h_i \sigma_i}$$
(1.40)

$$= \prod_{i=1}^{N} 2\cosh\beta h_i \rightsquigarrow m_i = -\frac{\partial F}{\partial h_i} = \tanh\beta h_i \qquad (1.41)$$

und unter Beachtung von $h_i = h$ für den homogenen Fall. Ohne Magnetfeld, d.h. für h = 0, ist die Magnetisierung also Null.

Das Bemerkenswerte an der Mean-Field-Lösung $m = \tanh [\beta(h + \mathcal{J}m)]$ für $\mathcal{J} \neq 0$ ist nun, das es selbst für Magnetfeld h = 0 eine endliche, **spontane Magnetisierung** geben kann: Die Gleichung

$$m = \tanh(\beta \mathcal{J}m), \quad \mathcal{J} \equiv \sum_{j} J_{1j}$$
 (1.42)

hat unterhalb einer kritischen Temperatur T_c Lösungen mit $m \neq 0$, nämlich genau eine positive und eine negative (SKIZZE). Hierbei bestimmt sich T_c aus der Steigung $\beta \mathcal{J}$ des tanh am Ursprung: ist diese grösser als 1, so gibt es drei Schnittpunkte des tanh mit der Geraden y = m, ist sie kleiner als 1, so gibt es nur die 'triviale' paramagnetische Lösung m = 0, d.h. wir finden

$$k_B T_c = \mathcal{J} = \sum_j J_{1j}, \quad \text{kritische Temperatur.}$$
 (1.43)

Die Mean-Field-Methode sagt also einen **Phasenübergang zweiter Ordnung** von einer paramagnetischen Phase mit m = 0 für h = 0 $(T > T_c)$ zu einer ferromagnetischen Phase $m \neq 0$ für h = 0 $(T < T_c)$ voraus. Für $T < T_c$ sind zwei endliche Magnetisierungen möglich (positiv oder negativ). Man interpretiert das so, dass nur eine (positiv oder negativ) spontan vom System angenommen wird, abhängig z.B. von kleinen Magnetisierungs'keimen', um die sich dann die Gesamtmagnetisierung aufbaut. Die ursprüngliche Symmetrie des Modells bezüglich Vertauschung von Spin \uparrow und \downarrow ist also für $T < T_c$ verlorengegangen: man spricht von **spontaner Symmetriebrechung**, die charakteristisch für das Auftreten eines Phasenübergangs ist. Im Fall des Ising-Modells bezieht sich diese Symmetriebrechung mathematisch gesprochen also auf die Symmetriegruppe Z_2 . Allgemein definiert man:

Definition Bei spontaner Symmetriebrechung befindet sich ein System ein einem thermischen Gleichgewichtszustand, dessen Symmetrie geringer ist als die des System–Hamiltonians.

Auf den ersten Blick scheint so etwas paradox zu sein, da sich ja auch ein makroskopischer, thermischer Zustand zumindest im Prinzip aus einem mikroskopischen System– Hamiltonian herleiten lassen sollte. Wir werden sehen, dass ein entscheidender Faktor für die spontane Symmetriebrechung die Grenzwertbildung ist, die in der Thermodynamik als 'thermodynamischer Limes' bekannt ist: Aus der Mathematik ist bekannt, dass bei solchen Grenzprozessen 'Dinge passieren können'.

1.3.3 Kritische Exponenten

Wir können nun die zugehörigen kritischen Exponenten für die berechnen: wir schreiben die Zustandsgleichung unseres magnetischen Systems als (Additionstheorem für tanh)

$$m = \tanh \left[\beta(h + \mathcal{J}m)\right] = \tanh \left[\beta h + \tau m\right), \quad \tau \equiv T_c/T$$
$$= \frac{\tanh \beta h + \tanh m\tau}{1 + (\tanh \beta h)(\tanh m\tau)} \rightsquigarrow \tanh \beta h = \frac{m - \tanh m\tau}{1 - m \tanh m\tau}$$
(1.44)

Aus

$$\beta h + O(h^3) = \left(m(1-\tau) - \frac{1}{3}m^3\tau^3 + \dots \right) \left(1 + m(m\tau - \frac{1}{3}m^3\tau^3 + \dots) \right)$$
$$= m(1-\tau) + m^3 \left(\tau - \tau^2 + \frac{1}{3}\tau^3 + \dots \right) + \dots$$
(1.46)

ergibt sich damit eine genäherte Zustandsgleichung

$$\beta h = m(1-\tau) + m^3 \left(\tau - \tau^2 + \frac{1}{3}\tau^3\right), \quad h, m \to 0.$$
 (1.47)

Um die Exponenten definieren zu können, benötigen wir zunächst Größen wie die spezifische Wärme sowie Suszeptibilitäten. Wir greifen zunächst auf die Thermodynamik zurück: Für magnetische Systeme lautet die Differentialform der reversiblen Arbeit

$$dW = HdM \tag{1.48}$$

mit den Beträgen H des Magnetfelds und dem Betrag M der Magnetisierung, vgl. STAN-LEY, CALLEN. Wir haben also im Vergleich zu den bisher betrachteten Systemen (Fluiden/Gasen) die Analogie

$$V \to -M, \quad p \to H.$$
 (1.49)

Entsprechend lautet der 1. Hauptsatz der Thermodynamik für magnetische Systeme

$$dU = \delta Q + H dM. \tag{1.50}$$

Die thermodynamischen Potentiale werden ebenso entsprechend modifiziert, z.B. F(T, M) = U - TS freie Energie und G(T, H) = U - TS - HM Gibbs-Potential.

In Analogie zu den Wärmekapazitäten, Kompressibilität etc. hat man (wir schreiben jetzt E für die Enthalpie) magnetische Response-Funktionen

$$C_M \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_M$$
, spez. Wärme, M const (1.51)

$$C_H \equiv \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_H$$
, spez. Wärme, *H* const (1.52)

$$\chi_T \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T$$
, isotherme Suszeptibilität (1.53)

$$\chi_S \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_S$$
, adiabatische Suszeptibilität (1.54)

$$\alpha_H \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H,\tag{1.55}$$

die z.B. über

$$\chi_T (C_H - C_M) = T \alpha_H^2 \tag{1.56}$$

zusammenhängen (beliebte AUFGABE in der THERMODYNAMIK).

Phasenübergänge bei magnetischen Systemen werden nun wiederum durch Nichtanalytizitäten in den thermodynamischen Potentialen beschrieben (BILD, Gibbs-Potential und M als Funktion von H für $T > T_c$, $T < T_c$, Freie Energie und H als Funktion von M für $T > T_c$, $T < T_c$.) Man hat also

$$M(H \to 0^+) = 0$$
, oberhalb T_c (1.57)

$$M(H \to 0^+) \neq 0$$
, unterhalb T_c : endliche Magnetisierung . (1.58)

Wir definieren nun die kritischen Exponenten mit der Analogie $V \to -M$, $p \to H$, Gl. (1.49), zum van-der-Waals-Gas. Um konsistent mit der Notation beim Ising-Modell zu bleiben, schreiben wir für die Magnetisierung M nun m (Magnetisierung pro Gitterplatz) und statt H nun h. Mit $t \equiv T/T_c - 1 = \tau^{-1} - 1$ sind dann die Definitionen

$$m(T, h \to 0) \propto (-t)^{\beta}$$
, Ordnungs-Parameter (1.59)

$$\chi_T \propto \begin{cases} (-t)^{-\gamma'} & T < T_c \\ t^{-\gamma} & T > T_c \end{cases}$$
(1.60)

$$C_h(h=0) \propto \begin{cases} (-t)^{-\alpha'} & T < T_c \\ t^{-\alpha} & T > T_c \end{cases}$$
(1.61)

$$h \propto m^{\delta} \quad T = T_c.$$
 (1.62)

Dass man hier dieselben Symbole α , β etc. für die Exponenten benutzt, muss im Prinzip im Nachhinein gerechtfertigt werden (s.u.)

Exponent δ (kritische lsotherme)

Wir setzen $\tau = 1$ und finden

$$h \sim m^3 \rightsquigarrow \delta = 3.$$
 (1.63)

wie im van-der-Waals Gas.

Exponent β

Wir setzen h = 0, also (AUFGABE)

$$m^2 = -3\varepsilon + \dots, \quad \varepsilon \equiv \tau^{-1} - 1 \tag{1.64}$$

und damit $\beta = 1/2$, wieder wie im van-der-Waals Gas.

Exponenten γ, γ'

Als AUFGABE. Wir fassen unsere Ergebnisse zusammen;

$$\alpha = \alpha' = 0, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad \gamma = 1, \quad \delta = 3.$$
 (1.65)

Der Vergleich mit Gl. (1.27), dass das dieselben Exponenten wie beim van-der-Waals-Gas sind. Das ist kein Zufall, sondern hat zwei Gründe: a) die Beschreibung von einfachen Fluiden, d.h. der 'realen Gase' durch die van-der-Waals-Gleichung ist nur näherungsweise gültig und entspricht effektiv einer Näherung wie der Mean-Field-Näherung im Ising-Modell. Das ist natürlich an dieser Stelle nicht völlig offensichtlich und muss aus einer Theorie der Fluide genauer gerechtfertigt werden, b) beide Systeme (van-der-Waals-Gas und Ising-Magnet) liegen in derselben Universalitätsklasse. Letzteres hängt mit der Natur des Ordnungsparameters zusammen, der in beiden Fällen eine einfache skalare Funktion ist.

Weitere Details hier in STANLEY.

1.3.4 Mean-Field-Methode als 'falsche' Theorie

Wesentliche Schwachpunkte der Mean-Field-Methode sind:

- Falsche Voraussage von Phasenübergängen, z.B. in d = 1 Dimensionen für das Ising-Modell, wo es in Wirklichkeit keinen Phasenübergang gibt (was man an der exakten Lösung des Ising-Modells in d = 1 sieht, s.u. bzw. ÜBUNGEN).
- 'Falsche' Werte für die kritischen Exponenten β etc., d.h. Werte, die z.B. für d = 2Dimensionen nicht mit denen der exakten Lösung des Ising-Modells (Onsager 1944) übereinstimmen.

Allerdings gibt es kaum exakte Lösungen, z.B. ist das Ising-Modell schon in d = 3 Dimensionen nicht mehr exakt lösbar. In der Tendenz ist die Mean-Field-Methode umso besser, je höher die Dimension des Systems ist. Die Mean-Field-Methode ist allerdings häufig gut als grobe, 'vorläufige' Beschreibung, um sich einen Überblick zu verschaffen, erste qualitative Aussagen zu machen etc. - immer mit dem Vorbehalt, dass die Resultate sicherlich mit Vorbehalt betrachtet werden müssen. In wechselwirkenden Quantensystemen, z.B. wechselwirkende Elektronen, ist das Pendant zur Mean-Field-Methode die Hartree-Fock-Theorie.

Eine bessere Vorstellung vom Stellenwert der Mean-Field-Methode gibt ihre Herleitung 1.) aus einem Variationsprinzip (wie bei Hartree-Fock), und wichtiger noch 2.) als Sattelpunktslösung der zum Modell zugehörigen Feldtheorie.

1.3.5 Mean-Field-Lösung aus Variationsprinzip

Wir benutzten hier ein Variationsverfahren, das dem Rayleigh–Ritz–Verfahren aus der Quantenmechanik entspricht:

Satz 1. Sei H der Hamiltonian eines Systems im thermischen Gleichgewicht mit freier Energie F zur Temperatur T. Für Variationszustände (Dichtematrizen) ρ gilt dann

$$F \le \langle H - TS \rangle \equiv \operatorname{Tr} \left[\rho (H + T \ln \rho) \right].$$
 (1.66)

AUFGABE: Beweise diese Ungleichung in zwei Schritten:

1. Seien ρ und ρ' zwei Zustände (Dichtematrizen) eines Systems. Beweise die Ungleichung

$$\operatorname{Tr}(\rho \log \rho) \ge \operatorname{Tr}(\rho \log \rho'). \tag{1.67}$$

Hinweis: Benutze die Spektralzerlegung der Dichtematrizen.

2. Benutze nun Gl. (1.67), um Gl. (1.66) zu zeigen.

Wir benutzen Gl. (1.66) nun für das Ising-Modell (hier konstantes Magnetfeld h)

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$
(1.68)

und eine einfach zu berechnende Form von ρ , nämlich wieder einen faktorisierenden Dichteoperator

$$\rho_B \equiv \frac{1}{Z_B} \exp\left(\beta B \sum_i \sigma_i\right), \quad Z_B = (2\cosh\beta B)^N.$$
(1.69)

mit dem freien Parameter B, der natürlich ein effektives Magnetfeld darstellt. B soll jetzt so variert werden, dass die rechte Seite der Gibbschen Ungleichung minimal wird und die Ungleichung damit optimal erfüllt ist. Dazu müssen wir natürlich erst einmal

die Erwartungswerte der Energie und Entropie mit dem Dichte
operator ρ_B berechnen:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{\sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \sigma_i e^{\beta B(\sigma_1 + \dots + \sigma_N)}}{\sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} e^{\beta B(\sigma_1 + \dots + \sigma_N)}} = \tanh(\beta B)$$
(1.70)

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{\sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \sigma_i \sigma_j e^{\beta B(\sigma_1 + \dots + \sigma_N)}}{\sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} e^{\beta B(\sigma_1 + \dots + \sigma_N)}} = \tanh^2(\beta B), \quad i \neq j$$
(1.71)

$$\rightsquigarrow \langle H \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \tanh^2(\beta B) - h \sum_i \tanh(\beta B)$$
 (1.72)

$$\equiv -\frac{N}{2}\mathcal{J}\tanh^2(\beta B) - Nh\tanh(\beta B)$$
(1.73)

Man beachte, dass der Modell-Hamiltonian keine 'Selbstwechselwirkungsanteile' enthält, d.h. $J_{ii} = 0$, und dass ausserdem für räumlich homogene (nicht von *i* abhängende) Kopplungen

$$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}J_{ij} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}J_{1j} = \frac{N}{2}\sum_{j}J_{1j} = \frac{N}{2}\mathcal{J}.$$
(1.74)

Der Erwartungswert der Entropie ist

$$\langle S \rangle = -\text{Tr}\rho \ln \rho = -\langle \beta B \sum_{i} \sigma_{i} - \ln Z_{B} \rangle$$

= $-\beta BN \tanh(\beta B) + N \ln(2 \cosh \beta B),$ (1.75)

insgesamt bekommen wir also

$$F < \langle H - TS \rangle \equiv \mathcal{F}(B)$$

$$\mathcal{F}(B) = -\frac{N}{2} \mathcal{J} \tanh^2(\beta B) + N(B - h) \tanh(\beta B) - TN \ln(2 \cosh \beta B).$$
(1.76)

Jetzt berechnen wir das Minimum durch Differenzieren von $\mathcal{F}(B)$. Wir beachten tanh' $x = 1 - \tanh^2 x$ und erhalten

$$\mathcal{F}'(B) = -N\mathcal{J}\beta \tanh(\beta B)[1 - \tanh^2(\beta B)] + N \tanh(\beta B) + N(B - h)\beta[1 - \tanh^2(\beta B)] - T\beta N \tanh\beta B$$
$$= N\beta (B - h - \mathcal{J} \tanh(\beta B)) [1 - \tanh^2(\beta B)] = 0$$
$$\rightsquigarrow B - h = \mathcal{J} \tanh(\beta B).$$
(1.77)

Wir schreiben das etwas um mittels $m = \langle \sigma_i \rangle = \tanh(\beta B)$

$$B - h = \mathcal{J} \tanh(\beta B) \rightsquigarrow B = \mathcal{J}m + h$$
 (1.78)

$$\rightsquigarrow m = \tanh(\beta B) = \tanh(\beta \mathcal{J}m + \beta h) \tag{1.79}$$

Das ist identisch mit der Selbstkonsistenzgleichung der Weiss'schen Molekularfeldnäherung!

Energie und Entropie (per Spin) lassen sich durch die (selbstkonsistente) Magnetisierung $m = \tanh(\beta \mathcal{J}m + \beta h)$ ausdrücken, nämlich als (AUFGABE).

$$\frac{\langle H \rangle}{N} = -\frac{J}{2}m^2 - hm \tag{1.80}$$

$$\frac{\langle S \rangle}{N} = -\sum_{\pm} \frac{1 \pm m}{2} \ln \frac{1 \pm m}{2}.$$
 (1.81)

In der Nähe des kritischen Punktes entwickeln wir die Entropie für kleine Magnetisierungen m,

$$\frac{\langle S \rangle}{N} = -\beta B \tanh(\beta B) + \ln(2 \cosh \beta B) = -\beta m (\mathcal{J}m + h) + \ln 2 - \frac{1}{2} \ln(1 - m^2) \\ = -\beta m (\mathcal{J}m + h) + \ln 2 + \frac{1}{2} \left(m^2 + \frac{1}{2} m^4 + \dots \right).$$
(1.82)

Insbesondere ist dann 2

$$\frac{\langle H - TS \rangle}{N} = -\frac{J}{2}m^2 - hm + m(\mathcal{J}m + h) - T\ln 2 - \frac{T}{2}\left(m^2 + \frac{1}{2}m^4 + ...\right)$$
$$= -T\ln 2 + \left(\frac{J}{2} - \frac{T}{2}\right)m^2 - \frac{T}{4}\left(m^4 + ...\right)$$
$$= -T\left[\ln 2 + G(T, m) + O(m^6)\right]$$
(1.83)

$$G(T,m) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{T_c}{T} \right) m^2 + \frac{m^4}{4}.$$
 (1.84)

Diskussion der Funktion G(T, m):

- Für $T > T_c$ ist der Vorfaktor vor m^2 positiv, deshalb hat die Funktion nur ein Minimum bei m = 0.
- Für $T < T_c$ ist der Vorfaktor vor m^2 negativ, es gibt **zwei Minima** $m \pm$ (SKIZZE).

Das Verhalten von G(T, m) beschreibt also gerade den erwarteten Phasenübergang. AUFGABE (Clausius-Mossotti-Formel): In der Elektrostatik polarisierbarer Medien ohne freie Ladungen gilt div $\mathbf{D} = 0$ mit der dielektrischen Verschiebung $\mathbf{D} = \mathbf{E} + \varepsilon_0^{-1} \mathbf{P} = \varepsilon \mathbf{E}$, die sich aus dem makroskopischen, durch äußere Quellen (z.B. freie Ladungen außerhalb des Mediums) erzeugten elektrischen Feld \mathbf{E} und der makroskopischen Polarisation \mathbf{P} zusammensetzt. Für homogene Medien nimmt man die Polarisation an als $\mathbf{P} = n\mathbf{p}$, wobei n die Dichte der mikroskopischen Dipole mit Dipolmoment \mathbf{p} ist, das nicht permanent sein soll, sondern sich proportional zum lokalen elektrischen Feld \mathbf{E}_{loc} am Ort des Dipols einstellt, d.h. $\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}_{\text{loc}}$ mit der *Polarisierbarkeit* α , die als gegebener (mikroskopischer)

 $^{^2}$ Man beachte, dass hier die rechte Seite eine Funktion von m ist. Die Extrema von G(T,m) bezüglich m entsprechen den Lösungen der Mean-Field-Gleichung. Die Ungleichung Gl. (1.76) bezieht sich aber auf Variation des Parameters B und nicht m.

Materialparameter angenommen wird. Ziel ist es, aus der mikroskopischen Polarisierbarkeit α einen Ausdruck für die makroskopische Materialkonstante ϵ (Dielektrizitätszahl) herzuleiten.

Man schreibe zunächst das lokale elektrische Feld \mathbf{E}_{loc} als Summe des elektrischen Feldes \mathbf{E} und der von allen anderen Dipolen erzeugten Felder (Superpositionsprinzip der Elektrostatik). Letzteres wird jetzt im nächsten Schritt durch ein mittleres Feld ersetzt. 1. Begründe kurz, wie das auf eine 'Mean-Field-Gleichung' der Form $\mathbf{p} = \alpha(\mathbf{E} - \gamma \mathbf{p})$ führt, ohne den Parameter γ hier genau zu spezifizieren.

2. Berechne den Parameter γ . Hierzu soll ein Mittelungsargument benutzt werden (welches, und was sind die Voraussetzungen z.B. an die räumliche Verteilung aller Dipole). Die Berechnung von γ läuft dann darauf hinaus, dass man eine kleine Kugel um einen festen Dipol betrachtet, außerhalb derer der Effekt aller anderen Dipole durch die (zunächst nicht bekannte) makroskopische Polarisation **P** beschrieben wird. Auf der Oberfläche der Kugel liefert **P** dann Randbedingungen, aus denen wie beim Gaußschen Gesetz der Elektrostatik das Feld im Innern der Kugel berechnet werden kann. Zeige, dass das Ergebnis unabhängig vom Kugelradius ist. Leite daraus schließlich die Beziehung

 $\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{1}{3} \frac{n\alpha}{\varepsilon_0}, \quad \text{Clausius-Mossotti-Formel}$ (1.85)

her.

AUFGABE: (Ising–Model mit unendlich weitreichiger Wechselwirkung). Wir betrachten Spins $\sigma_i = \pm 1$ auf N Gitterplätzen mit der Energie $H = -\frac{\gamma}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \sigma_i \sigma_j$, $\gamma > 0$.

1. Zeige, dass sich die kanonische Zustandssumme als

$$Z_N = \sum_{n=0}^{N} \binom{N}{n} e^{\beta \frac{\gamma}{N} (N-2n)^2}$$
(1.86)

schreiben läßt, wobei n die Anzahl der Spins nach unten (mit $\sigma_i = -1$) bezeichnet. 2. Zeige nun die Integraldarstellung

$$Z_N = \sqrt{\frac{N}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-N\Phi(y)}, \quad \Phi(y) \equiv y^2 - \ln\left(2\cosh\left(2\gamma\sqrt{\beta}y\right)\right). \quad (1.87)$$

3. Benutze eine Approximation für $N \to \infty$, um das Integral für Z_N auszuwerten. Zeige, dass daraus eine Selbstkonsistenzgleichung entsteht, deren Lösung einen Phasenübergang beschreibt. Berechne die kritische Temperatur. Skizziere die Funktion $\Phi(y)$ für verschiedene Temperaturen.

2. FELDTHEORIEN IN DER STATISTISCHEN MECHANIK

In Feldtheorien wird der Übergang von einzelnen, diskreten Freiheitsgraden (z.B. Punktladungen in der Elektrodynamik) zu Feldern vollzogen. Die Felder beschreiben in den klassischen mikroskopischen Theorien die Kräfte, die zwischen den Teilchen wirken. In der quantenmechanischen Version erhalten sie dann noch mehr Eigenständigkeit, d.h. sie beschreiben unabhängige Freiheitsgrade, was dann auch in der feldtheoretischen Beschreibung der statistischen Mechanik der Fall ist.

2.1 Classical Electrolytes

We consider a system of point charges, i.e. particles (ions) of charge q_{α} at position \mathbf{r}_{α} , in a three-dimensional medium with dielectric constant $\epsilon(\mathbf{r})$. Here, α labels the particle species of which there are M. The system charge density $\rho_S(\mathbf{r})$ at position \mathbf{r} (threedimensional vector) is

$$\rho_S(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^M \sum_{k_\alpha}^{N_\alpha} q_\alpha \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{k_\alpha}), \qquad (2.1)$$

where N_{α} is the number of particles of species α . We also assume that there are additional, fixed particles at a density $\sigma(\mathbf{r})$ so that the total charge density $\rho(\mathbf{r})$ is

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^{M} \sum_{k_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}} q_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{k_{\alpha}}) + \sigma(\mathbf{r}).$$
(2.2)

The total electrostatic (interaction) energy E of the system due to the Coulomb-interaction between the particles is given by

$$E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}), \qquad (2.3)$$

where the potential $\phi(\mathbf{r})$ obeys Poisson's equation: we use Maxwell's equation for the electric displacement $\mathbf{D}(\mathbf{r})$,

$$\nabla \mathbf{D}(\mathbf{r}) = 4\pi\rho(\mathbf{r}),\tag{2.4}$$

where we note that all charges are 'true' charges and not polarization charges. Then with $\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r})$ and the electric field $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(\mathbf{r})$, we find

$$-\nabla\epsilon(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r}) = 4\pi\rho(\mathbf{r}). \tag{2.5}$$

The associated Green's function to this problem fulfills

$$-\frac{1}{4\pi}\nabla\epsilon(\mathbf{r})\nabla G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$
(2.6)

We obtain the potential, neglecting boundary terms,

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}'), \quad boundary \ terms \ neglected. \tag{2.7}$$

(Neglecting the boundary terms is not quite without any problems, see below).

The energy of the electrostatic field can then be written entirely in terms of the charge distribution

$$E = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}')$$
(2.8)

The expression for the energy given above contains contribution from the interaction of each ion with itself — the self-energy. Subtracting this term from the energy, we write

$$E' = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, k} q_\alpha^2 G_0(\mathbf{r}_{k_\alpha}, \mathbf{r}_{k_\alpha})$$
(2.9)

We also assume that there are external potentials $u_{\alpha}(\mathbf{r})$ acting on particles of type α . The total classical Hamilton function of the system is then

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha=1}^{M} \sum_{k_{\alpha}}^{N_{\alpha}} \left[\frac{\mathbf{p}_{k_{\alpha}}^{2}}{2m_{\alpha}} + u_{\alpha}(\mathbf{r}_{k_{\alpha}}) + E'\{\mathbf{r}_{k_{\alpha}}\} \right].$$
(2.10)

Thermodynamical quantities of the system are best obtained from the grand partition sum Z_G in the grand-canonical ensemble at fixed temperature

$$k_B T \equiv \beta^{-1} \tag{2.11}$$

and chemical potentials μ_{α} for particles of type α . The grand partition sum Z_G is obtained from the partition sum $Z(N_1, ..., N_M)$ of the canonical ensemble at fixed temperature and fixed particle numbers $N_1, ..., N_M$ of species $\alpha = 1, ..., M$,

$$Z_G = \sum_{N_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{N_M=0}^{\infty} \prod_{\alpha=1}^{M} e^{\beta \mu_{\alpha} N_{\alpha}} Z(N_1, ..., N_M).$$
(2.12)

In classical physics, the kinetic and potential energy terms in the Hamiltonian commute. The partition sum therefore contains the (trivial) contribution from the kinetic energy in the form of products of thermal wave lengths Λ_{α} , and the Gibbs correction factor in order to account for the fact that particles of the same species are 'indistinguishable'. One therefore has

$$Z_G = \sum_{N_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{N_M=0}^{\infty} \prod_{\alpha=1}^{M} \frac{e^{\beta \mu_{\alpha} N_{\alpha}}}{N_{\alpha}! \Lambda_{\alpha}^{3N_{\alpha}}} \int \prod_{\alpha=1}^{M} \prod_{k_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}} d^3 \mathbf{r}_{k_{\alpha}} e^{-\beta \left[\sum_{\alpha,k} u_{\alpha}(\mathbf{r}_{k_{\alpha}}) + E'\{\mathbf{r}_{k_{\alpha}}\}\right]}.$$
 (2.13)

2.1.1 Hubbard-Stratonovich Transformation

The key idea now is to get rid of the term

$$e^{-\frac{1}{2}\beta\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\rho(\mathbf{r})G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')} \tag{2.14}$$

which comes from the interaction energy E', Gl. (2.9). This can be done at the expense of introducing additional Gaussian integrations over auxiliary fields. The Hubbard-Stratonovich transformation is best carried out by replacing the continuous function $\rho(\mathbf{r})$ by a vector with *n* components $\rho_j \equiv \rho(\mathbf{r}_j)$

$$\int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') \approx \varepsilon^2 \sum_{i,j=1}^n \rho_i G_{ij} \rho_j, \quad \varepsilon \to 0, \quad n \to \infty.$$
(2.15)

We then use the Gaussian identity

$$e^{-\frac{1}{2}\beta\varepsilon^{2}\sum_{i,j}^{n}\rho_{i}G_{ij}\rho_{j}} = \left(\frac{\det(\beta G_{0})^{-1}}{(2\pi)^{n}}\right)^{\frac{1}{2}}\int d\Psi_{1}...d\Psi_{n}e^{-\frac{1}{2\beta}\varepsilon^{2}\sum_{i,j}^{n}\Psi_{i}\frac{1}{\varepsilon^{2}}G_{ij}^{-1}\Psi_{j}-i\varepsilon\sum_{i}\rho_{i}\Psi_{i}}.$$
(2.16)

In the limit $\varepsilon \to 0$, this yields

$$e^{-\frac{1}{2}\beta\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\rho(\mathbf{r})G_0(\mathbf{r},\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}')} = \frac{1}{\sqrt{\det G_0}}\int D\Psi(\mathbf{r})e^{-\frac{1}{2\beta}\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\Psi(\mathbf{r})G_0^{-1}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')-i\int d\mathbf{r}\rho(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})}.$$
(2.17)

Here, the path integral measure is defined as

$$D\Psi(\mathbf{r}) = \lim_{n \to \infty} (2\pi\beta)^{-n/2} d\Psi_1 \dots d\Psi_n.$$
(2.18)

Now we insert this expression into the grand partition sum Z_G ,

$$Z_{G} = \frac{1}{\sqrt{\det G_{0}}} \int D\Psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{1}{2\beta} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi(\mathbf{r}) G_{0}^{-1}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}')} e^{-i \int d\mathbf{r}\sigma(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})}$$
(2.19)

$$\times \sum_{N_{1}=0}^{\infty} \cdots \sum_{N_{M}=0}^{\infty} \prod_{\alpha=1}^{M} \frac{e^{\beta\mu_{\alpha}N_{\alpha}}}{N_{\alpha}!\Lambda_{\alpha}^{3N_{\alpha}}} \int \prod_{\alpha=1}^{M} \prod_{k_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}} d^{3}\mathbf{r}_{k_{\alpha}} e^{-\beta \sum_{\alpha,k} \left[u_{\alpha}(\mathbf{r}_{k_{\alpha}}) + \frac{i}{\beta}q_{\alpha}\Psi(\mathbf{r}_{k_{\alpha}}) - \frac{1}{2}q_{\alpha}^{2}G_{0}(\mathbf{r}_{k_{\alpha}},\mathbf{r}_{k_{\alpha}}) \right]}$$

The term $e^{-i\int d\mathbf{r}\sigma(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})}$ comes from the fixed external charge density, $\sigma(\mathbf{r})$.

The second line can now be drastically simplified: consider that terms like

$$\int \prod_{k_1} d^3 \mathbf{r}_{k_1} e^{-\beta \sum_{k_1=1}^{N_1} u_1(\mathbf{r}_{k_1})} = \left[\int d\mathbf{r} e^{-\beta u_1(\mathbf{r})} \right]^{N_1}$$
(2.20)

simply are powers of integrals over the coordinates of one particle. This means

$$\sum_{N_{1}=0}^{\infty} \cdots \sum_{N_{M}=0}^{\infty} \prod_{\alpha=1}^{M} \frac{e^{\beta \mu_{\alpha} N_{\alpha}}}{N_{\alpha}! \Lambda_{\alpha}^{3N_{\alpha}}} \int \prod_{\alpha=1}^{M} \prod_{k_{\alpha}=1}^{N_{\alpha}} d^{3} \mathbf{r}_{k_{\alpha}} e^{-\beta \sum_{\alpha,k} u_{\alpha}(\mathbf{r}_{k_{\alpha}})} = \sum_{N_{1}=0}^{\infty} \cdots \sum_{N_{M}=0}^{\infty} \prod_{\alpha=1}^{M} \frac{e^{\beta \mu_{\alpha} N_{\alpha}}}{N_{\alpha}! \Lambda_{\alpha}^{3N_{\alpha}}} \left[\int d\mathbf{r} e^{-\beta u_{\alpha}(\mathbf{r})} \right]^{N_{\alpha}} = \prod_{\alpha=1}^{M} \exp \left[\Lambda_{\alpha}^{-3} \int d\mathbf{r} e^{\beta \mu_{\alpha} - \beta u_{\alpha}(\mathbf{r})} \right]$$
(2.21)

This is actually nothing but the grand partition sum of a gas of M particle species $\alpha = 1, ..., M$ at chemical potential μ_{α} and inverse temperatur β in one-particle potentials $u_{\alpha}(\mathbf{r})$,

$$Z_G^{\text{ref}}[\{\gamma_\alpha\}] \equiv \exp\left[\sum_{\alpha=1}^M \Lambda_\alpha^{-3} \int d\mathbf{r} e^{\gamma_\alpha(\mathbf{r})}\right], \quad \gamma_\alpha(\mathbf{r}) \equiv \beta \left[\mu_\alpha - u_\alpha(\mathbf{r})\right], \quad (2.22)$$

where the notation $\{\gamma_{\alpha}\}$ denotes a functional dependence on $\gamma_1(\mathbf{r}), ..., \gamma_M(\mathbf{r})$.

The full grand partition sum Z_G of the interacting system can now be written in a very elegant form,

$$Z_{G} = \frac{1}{\sqrt{\det G_{0}}} \int D\Psi(\mathbf{r}) e^{-\frac{1}{2\beta} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi(\mathbf{r}) G_{0}^{-1}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}')} e^{-i \int d\mathbf{r}\sigma(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r})} \\ \times Z_{G}^{\text{ref}}[\{\gamma_{\alpha} - iq_{\alpha}\Psi + \frac{\beta q_{\alpha}^{2}}{2}G_{0}\}].$$

$$(2.23)$$

This expression now also gives rise to a very intuitive interpretation: the interacting grand partition sum is an average over fields $\Psi(\mathbf{r})$ of the grand partition sum of a non-interacting gas of particles (M species) subject to a combination of the fixed, external chemical potentials μ_{α} and potentials u_{α} and the additional, fluctuating field $\Psi(\mathbf{r})$. The average is performed with a Gaussian weight factor (and the term $e^{-i\int d\mathbf{r}\sigma(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})}$), and it is done in 'path-integral' form over all possible configurations of the fluctuating field.

2.1.2 Mean-Field Solution

This consists in replacing the functional integral for Z_G by the value of the integrand at an extremum $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$,

$$Z_G^{\rm MF} = e^{-\frac{1}{2\beta}\int d\mathbf{r} d\mathbf{r}'\bar{\Psi}(\mathbf{r})G_0^{-1}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\bar{\Psi}(\mathbf{r}') - i\int d\mathbf{r}\sigma(\mathbf{r})\bar{\Psi}(\mathbf{r}) + \ln Z_G^{\rm ref}[\{\gamma_\alpha - iq_\alpha\bar{\Psi}\}]},\tag{2.24}$$

where here and in the following we no longer include the self-interaction term $\frac{\beta q_{\alpha}^2}{2}G_0$ in Z_G^{ref} . The mean field solution, i.e. the extremum $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$, is found by a functional derivative

$$\frac{\delta Z_G^{\rm MF}}{\delta \bar{\Psi}(\mathbf{r})} = 0, \qquad (2.25)$$

which we find as

$$-\frac{1}{\beta}\int d\mathbf{r}' G_0^{-1}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\bar{\Psi}(\mathbf{r}') + \frac{\delta \ln Z_G^{\text{ref}}[\gamma_\alpha - iq_\alpha\bar{\Psi}]}{\delta\bar{\Psi}(\mathbf{r})} - i\sigma(\mathbf{r}) = 0.$$
(2.26)

For the derivative of $\ln Z_G^{\text{ref}}$ we use its explicit form,

$$\ln Z_G^{\text{ref}}[\gamma_{\alpha} - iq_{\alpha}\bar{\Psi}] = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^{-3} \int d\mathbf{r} e^{\gamma_{\alpha} - iq_{\alpha}\bar{\Psi}}$$
(2.27)

$$\rightsquigarrow \frac{\delta \ln Z_G^{\text{ref}}[\gamma_\alpha - iq_\alpha \bar{\Psi}]}{\delta \bar{\Psi}(\mathbf{r})} = -i \sum_\alpha \Lambda_\alpha^{-3} q_\alpha e^{\gamma_\alpha - iq_\alpha \bar{\Psi}(\mathbf{r})}$$
(2.28)

In the following, we assume a constant dielectric function $\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon$. We then use

$$\int d\mathbf{r}'' G_0^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') G_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
(2.29)

and the fact that G_0 solves Poisson's equation, which leads to (EXERCISE)

$$\Delta_{\mathbf{r}} i \bar{\Psi}(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \left[\sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^{-3} q_{\alpha} e^{\gamma_{\alpha} - i q_{\alpha} \bar{\Psi}(\mathbf{r})} + \sigma(\mathbf{r}) \right].$$
(2.30)

Re-defining the imaginary potential Ψ into a real potential Φ ,

$$\Phi(\mathbf{r}) \equiv \frac{i}{\beta} \bar{\Psi}(\mathbf{r}), \qquad (2.31)$$

we finally obtain the desired mean-field equation,

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \left[\sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^{-3} q_{\alpha} e^{\beta [\mu_{\alpha} - u_{\alpha}(\mathbf{r}) - q_{\alpha}\Phi(\mathbf{r})]} + \sigma(\mathbf{r}) \right].$$
(2.32)

This is the **Poisson-Boltzmann** equation: a second order PDE for the unknown potential $\Phi(\mathbf{r})$ due to a distribution of point charges in the grand-canonical ensemble at fixed inverse temperature β , chemical potentials μ_{α} , fixed external potentials u_{α} , and a fixed external charge density $\sigma(\mathbf{r})$. The term on the r.h.s of the Poisson-Boltzmann (minus $\sigma(\mathbf{r})$) is in fact just the charge density of a non-interacting gas of charges in a potential $u_{\alpha}(\mathbf{r}) + q_{\alpha} \Phi(\mathbf{r})$,

$$\bar{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^{-3} q_{\alpha} e^{\beta [\mu_{\alpha} - u_{\alpha}(\mathbf{r}) - q_{\alpha} \Phi(\mathbf{r})]}.$$
(2.33)

This density is, of course, nothing but a version of the barometric formula (barometrische Höhenformel).

The inhomogeneous term on the r.h.s. of the Poisson-Boltzmann is thus *non-linear* in $\Phi(\mathbf{r})$ which makes even the solution at mean field level non-trivial in general.

Let us mention that the Poisson-Boltzmann equation can be derived much easier in a phenomenological way, simply by inserting the thermodynamic equilibrium density $\bar{\rho}(\mathbf{r})$ of a gas in a potential $\phi(\mathbf{r})$ (given by the Boltzmann factors) into the Poisson equation: that is the origin of the name of that equation. However, the derivation via the *field theory* (functional integration, Hubbard-Stratonovich transformation) has the big advantage that one can calculate *corrections to mean field*, i.e., corrections to the Poisson-Boltzmann equation. These come from fluctuations of the fields $\Psi(\mathbf{r})$ around their mean-field value $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$. These fluctuations can be very important, e.g. in cases were the solution of the Poisson-Boltzmann equation is simply zero. The fluctuations can be calculated 'loop-wise' by expanding the functional integral around $\bar{\Psi}(\mathbf{r})$ in very much the same way as one does for the Gaussian fluctuations around Mean-Field theory for other models, e.g. the Ising Model (see below).

2.1.3 Poisson-Boltzmann Theory

Here, we follow the Review Article by D. Andelman in 'Handbook of Biological Physics', Vol. 1, ed. R. Lipowsky and E. Sackmann (Elsevier, 1995).

We are concerned with solutions of the Poisson-Boltzmann equation

$$\Delta_{\mathbf{r}} \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \left[\sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^{-3} q_{\alpha} e^{\beta [\mu_{\alpha} - u_{\alpha}(\mathbf{r}) - q_{\alpha} \phi(\mathbf{r})]} + \sigma(\mathbf{r}) \right]$$
(2.34)

that we derived in mean-field approximation to the electrolyte problem in the previous section. Here, we are interested in situations involving boundaries in order to model, for example, membranes. The dielectric constant ϵ is the one for water if we are interested in a model for ion solutions in water, where the water just acts as a background medium.

In the following, we consider $\sigma(\mathbf{r}) = 0$ and $u_{\alpha}(\mathbf{r}) = 0$ (no external charges, no external potentials). There is only the potential $\Phi(\mathbf{r})$ generated by the fluctuating ions. The Poisson-Boltzmann equation then reads

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \left[\sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^{-3} q_{\alpha} e^{\beta[\mu_{\alpha} - q_{\alpha}\Phi(\mathbf{r})]} \right] \equiv -\frac{4\pi}{\epsilon} \sum_{\alpha} q_{\alpha} n_{\alpha}(\mathbf{r}), \qquad (2.35)$$

where

$$n_{\alpha}(\mathbf{r}) = \Lambda_{\alpha}^{-3} e^{\beta [\mu_{\alpha} - q_{\alpha} \Phi(\mathbf{r})]}$$
(2.36)

are the mass densities of particle type α . We introduce the particle densities n_{α} (reference densities) at zero potential $\Phi(\mathbf{r}) = 0$,

$$n_{0,\alpha} \equiv \Lambda_{\alpha}^{-3} e^{\beta \mu_{\alpha}}, \qquad (2.37)$$

which means that we can write

$$n_{\alpha}(\mathbf{r}) = n_{0,\alpha} e^{-\beta q_{\alpha} \Phi(\mathbf{r})} \tag{2.38}$$

and the Poisson-Boltzmann equation can be written as

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon} \sum_{\alpha} q_{\alpha} n_{0,\alpha} e^{-\beta q_{\alpha} \Phi(\mathbf{r})}.$$
(2.39)

Each ion mass density thus obeys a Boltzmann distribution with a potential $\Phi(\mathbf{r})$ determined by the Poisson-Boltzmann equation.

Classification M = 1

For M = 1, there is only one type of ions, e.g. positive ions such that

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon}q_{+}n_{0,+}e^{-\beta q_{+}\Phi(\mathbf{r})}.$$
(2.40)

Overall *charge neutrality* is usually guaranteed by charges on the boundaries of the system. For example, such a boundary can be a negatively charged membrane with an adjacent solution of positive ions. The positive ions are then called **counterions** because they counter-balance the charge of the membrane.

Classification M = 2, symmetric electrolyte $n_{0,+} = n_{0,-} = n_0$, $q_+ = -q_- = q > 0$

In this case, one has two types of ions (positive and negative) with charge neutrality

$$\sum_{\alpha} q_{\alpha} n_{0,\alpha} = 0 \tag{2.41}$$

guaranteed by all the ions themselves. The Poisson-Boltzmann equation then reads

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon}qn_0 \left[e^{-\beta q\Phi(\mathbf{r})} - e^{\beta q\Phi(\mathbf{r})}\right] = \frac{8\pi qn_0}{\epsilon}\sinh\beta q\Phi(\mathbf{r})$$
(2.42)

The *linearized symmetric case* is obtained by linearising the M = 2 symmetric electrolyte Poisson-Boltzmann according to

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = \frac{8\pi q n_0}{\epsilon} \sinh\beta q \Phi(\mathbf{r}) \approx \frac{8\pi q n_0}{\epsilon} \beta q \Phi(\mathbf{r}), \quad \beta q \Phi(\mathbf{r}) \ll 1.$$
(2.43)

The r.h.s. of $\Delta_{\mathbf{r}} \Phi(\mathbf{r}) = \lambda_D^{-2} \Phi(\mathbf{r})$ naturally defines a length scale,

$$\lambda_D \equiv \left(\frac{8\pi n_0 q^2}{\epsilon k_B T}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad \text{Debye-Hückel length.} \quad (2.44)$$

EXERCISE: check the numbers given by Andelman, i.e. $\lambda_D \approx 3\mathring{A}$ for 1M NaCl solution, and $\lambda_D \approx 1\mu m$ for pure water at pH 7 and room temperature.

2.1.4 Single, charged membrane and solution with M = 1 ion type

We consider a surface z = 0 with a constant negative surface charge density $\sigma < 0$, and a solution of positive ions with charge q_+ in the half space z > 0. The positive ions are called **counterions**.

There is no external potential;

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi}{\epsilon}\Lambda_{+}^{-3}q_{+}e^{\beta[\mu_{+}-q_{+}\Phi(\mathbf{r})]},$$
(2.45)

and as mentioned above the external charge density $\sigma(\mathbf{r})$ is not included here: instead, the negative surface charge density $\sigma < 0$ is regarded as part of the boundary. We write this equation as

$$\Delta_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi q_+}{\epsilon} n_0 e^{-\beta q_+ \phi(\mathbf{r})}, \quad n_0 \equiv \Lambda_+^{-3} q_+ e^{\beta \mu_+}, \tag{2.46}$$

where n_0 is the mass density of the ions at zero potential $\phi = 0$.

The geometry of the problem immediately shows that we only have to deal with a one-dimensional problem in z-direction,

$$\Phi''(z) = -\frac{4\pi q_+}{\epsilon} n_0 e^{-\beta q_+ \Phi(z)}, \qquad (2.47)$$

because the potential must not depend on the x and the y direction. We then obviously need *two* boundary conditions in order to solve this equation as a boundary value problem. These conditions come from fixing the value of the electric field $E(z) = -\Phi'(z)$ (which points in z-direction),

$$E(z = \infty) = , \quad E(z = 0) = -\Phi'(z = 0) = -\frac{4\pi}{\epsilon}\sigma.$$
 (2.48)

The last condition comes from applying Gauss' law on a box very closely around the plane z = 0 and the requirement that

$$E(z < 0) = 0, (2.49)$$

which means that there is no electric field in the other half-space without ions (we could, e.g., demand that z < 0 consists of an infinitely thick metal).

We write an Ansatz

$$\Phi(z) = a \ln(z+b) + c \rightsquigarrow \Phi'(z) = \frac{a}{z+b} \rightsquigarrow \frac{a}{b} = -\frac{4\pi}{\epsilon}\sigma \quad (2.50)$$

$$\Rightarrow \Phi''(z) = -\frac{a}{(z+b)^2} = -\frac{4\pi q_+}{\epsilon} n_0 e^{-\beta q_+(a\ln(z+b)+c)}$$
(2.51)

$$= -\frac{4\pi q_{+}}{\epsilon} n_0 \left[e^{-\beta q_{+}c} (z+b)^{-\beta q_{+}a} \right]$$
(2.52)

$$\rightarrow -\frac{4\pi q_+}{\epsilon} n_0 e^{-\beta q_+ c} = -a, \quad \beta q_+ a = 2.$$
 (2.53)

Collecting terms, this leads to the solution

$$\Phi(z) = \frac{2k_BT}{q_+} \ln \frac{z+b}{2\lambda_D}, \qquad (2.54)$$

where we defined another length scale,

$$b \equiv \frac{\epsilon}{2\pi |\sigma| \beta q_+}$$
, Gouy-Chapman length (2.55)

This length can be interpreted as follows: Consider the modulus of the electric field E_{σ} generated in both directions by an infinite plate with charge surface density σ embedded into a homogeneous medium with dielectric constant ϵ (no ions),

$$E_{\sigma} = \frac{2\pi |\sigma|}{\epsilon} \tag{2.56}$$

(again from Gauss' law). Then, the Gouy-Chapman length b is given by

$$bq_+E_\sigma = k_B T, (2.57)$$

which is the length over which a point charge q_+ has to move in the constant field E_{σ} in order to aquire the energy $k_B T$.

Furthermore, the Gouy-Chapman length measures the thickness of the counterion layer close to the surface in the above single-membrane problem, where we have overall charge neutrality (EXERCISE). Then, the integrated counterion density (per area) attracted to the surface from z = 0 to z = b is exactly $-\sigma/2$ (EXERCISE).

To continue with the solution of our single membrane problem, we obtain the counterion density $n_+(z)$ from the r.h.s. of the Poisson.Boltzmann equation,

$$\Phi''(z) = -\frac{4\pi q_+}{\epsilon} n(z), \quad n(z) \equiv n_0 e^{-\beta q_+ \Phi(z)}$$
(2.58)

and thus by inserting

$$n(z) = n_0 e^{-\beta q_+ \frac{2}{\beta q_+} \ln \frac{z+b}{2\lambda_D}} = n_0 \frac{4\lambda_D^2}{(z+b)^2} = \frac{\epsilon k_B T}{2\pi q_+^2} \frac{1}{(z+b)^2} = \frac{1}{2\pi l} \frac{1}{(z+b)^2}$$
(2.59)

where again we have introduced yet another length scale,

$$l \equiv \frac{q_+^2}{\epsilon k_B T} = \frac{1}{8\pi n_0 \lambda_D^2}, \quad \text{Bjerrum length.}$$
(2.60)

The Bjerrum length can be interpreted as follows: Consider the electrostatic potential ϕ_l generated by a single point charge q_+ at a distance r,

$$\phi_r = \frac{q_+}{\epsilon r}.\tag{2.61}$$

The Bjerrum length l is the distance r = l such that the potential energy $q_+\phi_r$ of a second point charge q_+ equals k_BT ,

$$\frac{q_+^2}{\epsilon l} = k_B T. \tag{2.62}$$

Note that the Bjerrum length is a 'fixed' quantity when q_+ , T, and ϵ are regarded as fixed. In particular, there is no dependence on surface charges (as in the Gouy-Chapman length) and no 'geometrical' interpretation.

2.2 Landau–Theorie

Hier gibt es mehrere Ausgangspunkte. Einer ist die verblüffenden Analogie zwischen Fluiden und Magneten in deren kritischen Verhalten, zumindest im Rahmen der einfachen Näherungen, die wir oben gemacht haben. Dadurch ergibt sich der Versuch, eine allgemeine Theorie der Phasenübergänge zu konstruieren, die nicht so sehr auf mikroskopischen Details aufbaut, sondern eher auf bestimmten Symmetrien sowie einer Phänomenologie z.B. von korrespondierenden Zustandsgleichungen.

Wie bei den Grundgleichungen in den mikroskopischen Theorien (Mechanik, Elektrodynamik und Quantenmechanik) würde man solche Zustandsgleichungem dann zumindest für Phasenübergänge in der Nähe der kritischen Punkte gerne aus einem Variationsprinzip können.

Konkret betrachten wir nochmals die Zustandsgleichung Gl. (1.47) des Ising–Modells in Mean–Field–Näherung,

$$\beta h = m(1-\tau) + m^3(\tau - \tau^2 + \tau^3/3 + \dots)$$
(2.63)

mit $\tau = T_c/T$. Mit üblichen Definition $t \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$ (Abweichung von T_c) und Entwickeln für t > 0

$$\tau = \frac{1}{1+t} = 1 - t + t^2 - t^3 + \dots, \quad 1 - \tau = t + O(t^2)$$

$$\tau - \tau^2 + \tau^3/3 = 1 - t - (1 - 2t) + \frac{1}{3}(1 - t)(1 - 2t) + O(t^2) = \frac{1}{3} + O(t^2) \quad (2.64)$$

erhalten wir die Zustandsgleichung zu

$$\beta h = mt + \frac{1}{3}\eta^3 + \dots, \quad m \ll 1, \quad |t| \ll 1.$$
 (2.65)

wird.

Für das Gas-Flüssigkeit-System betrachten wir wiederum die Zustandsgleichung des van-der-Waals-Gases in der Nähe des kritischen Punktes (P_c, V_c, T_c) , (AUFGABE),

$$p = 4t - 6tv - \frac{3}{2}v^3 + O(tv^2), \quad p = P/P_c - 1, \quad v = V/V_c - 1$$
 (2.66)



Fig. 2.1: (from N. Goldenfeld, 'Lectures on Phase Transitions and The Renormalization Group'

Der Ordnungsparameter ist jetzt statt m die Dichtedifferenz

$$\eta \equiv \frac{\rho - \rho_c}{\rho_c} = \frac{V_c}{V} - 1 = \frac{1}{1+v} - 1 = \frac{-v}{v+1},$$
(2.67)

womit

$$p = 4t + 6t\eta + \frac{3}{2}\eta^3 + O(t\eta^2), \quad |\eta| \ll 1, \quad |t| \ll 1.$$
(2.68)

Die Analogie von magnetischen und fluiden Systemen in der Nähe des kritischen Punktes legt also eine Verallgemeinerung nahe: In der Landau-Theorie nimmt man an, dass die Zustandsgleichung in der Nähe von T_c durch Minimieren eines Funktionals (einer Funktion) L des Ordnungsparameters (den wir im Folgenden immer als ϕ bezeichnen) erhalten werden kann. In der Nähe von T_c hat L eine Taylor-Entwicklung,

$$L[\phi] = a_0 + a_1\phi + a_2\phi^2 + a_3\phi^3 + a_4\phi^4 + \dots$$
 (2.69)

Beispiel magnetisches System:

$$L_{\text{Ising}}[\phi] = a_0 - \beta h\phi + \frac{t}{2}\phi^2 + \frac{1}{12}\phi^4 + \dots$$
 (2.70)

$$\rightarrow 0 = -\beta h + t\phi + \frac{1}{3}\phi^3 + \dots, \quad \text{Magnet}$$
 (2.71)

$$L_{\rm vdWaals}[\phi] = a_0 + (4t - p)\phi + 3t\phi^2 + \frac{3}{8}\phi^4 + \dots$$
 (2.72)

$$\rightarrow p = 4t + 6t\phi + \frac{3}{2}\phi^3 + \dots,$$
 Fluid (2.73)

$$|\phi| \ll 1, \quad |t| \ll 1.$$
 (2.74)

In beiden Fällen hat L die gleiche Struktur als Polynom vierter Ordnung: der Koeffizient $a_4 > 0$. Der Koeffizient a_2 wechselt das Vorzeichen bei T_c , was zum Auftreten von zwei Minima $\pm \phi \neq 0$ für $T < T_c$ führt (Bild).

(GOLDENFELD) In der Landau-Theorie postuliert man jetzt allgemein, dass die Thermodynamik eines Systems qualitativ zumindest in der Nähe eines kritischen Punktes durch ein analyisches Funktional $L[\phi]$ eines Ordnungsparameters ϕ beschrieben wird Im einfachsten Fall ist ϕ einfach eine reelle Zahl und $\mathcal{L}[\phi] : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ eine reelle Funktion einer Variablen ϕ , aber typischerweise hat man entweder $\phi \in \mathbb{R}^N$ als N-komponentigen Vektor, oder $\phi = \phi(\mathbf{r})$ als Funktion. Im letzten Fall hat man dann üblicherweise die Darstellung des Funktionals als Integral über eine Dichte $\mathcal{L}(\phi(\mathbf{r}))$,

$$L[\phi] = \int d^d \mathbf{r} \mathcal{L}(\phi(\mathbf{r})), \qquad (2.75)$$

wie wir es z.B. aus der Elektrodynamik kennen (s. SKRIPT)

Eine typische Form für homogene Systeme (in denen die Ortsabhängigkeit keine Rolle spielt) ist motiviert durch die Beispiel Gl. (2.70);

$$L[\phi] = a_0 + a_2\phi^2 + a_4\phi^4.$$
(2.76)

Der Vergleich mit Gl. (2.69) zeigt, dass wir hier nur gerade Potenzen von ϕ mitgenommen haben und die Taylorentwicklung nach dem vierten Term abgebrochen haben, was aber in der Nähe der kritischen Temperatur für die Beispiele Gl. (2.70) offensichtlich völlig ausreicht.

Allerdings würde uns eine solche Form Gl. (2.76) nicht weiter bringen, denn das ist ja nichts anderes als eine Umformulierung bekannter Tatsachen. Wir wollen zumindest räumliche Fluktuationen des Ordnungsparameter $\phi(\mathbf{r})$ zulassen, der dann also ortsabhängig wird. Dabei stellen sich zwei Fragen: 1. wie sieht dann das Analogon von Gl. (2.76) aus; und 2. wie sollen jetzt Zustandsgleichungen und überhaupt thermodynamische Eigenschaften berechnet werden. Um das zu beantworten, greifen wir noch einmal auf das Ising-Modell als ein konkretes Beispiel zurück.

2.2.1 Das Ising–Modell als Feldtheorie

Wir schreiben die Zustandssumme für das Ising-Modell Gl. (1.28)

$$e^{-\beta F} = Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\frac{1}{2}\beta \sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \beta \sum_i h_i\sigma_i}$$
(2.77)

mit Hilfe eines 'Tricks' um, nämlich mittels Gauss'scher Integrale (Beweis als AUFGA-BE),

$$e^{\frac{1}{2}\beta\sum_{ij}\sigma_i J_{ij}\sigma_j} = \frac{1}{\sqrt{\det\beta J}} \int \frac{dH_1}{\sqrt{2\pi}} \dots \frac{dH_N}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij}H_i(J)_{ij}^{-1}H_j + \sum_i H_i\sigma_i}$$
(2.78)

$$\equiv \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N} \det \beta J} \int D[H] \exp\left[-\frac{1}{2\beta} H^T J^{-1} H + H^T \sigma\right].$$
(2.79)

Dabei führen wir folgende Notation ein: J ist die Matrix der J_{ij} ist, det βJ die Determinante von βJ und J^{-1} die Inverse von J. ¹ Weiterhin ist H^T der Zeilenvektor der N Integrationsvariablen H_i , $\int D[H] = dH_1...dH_N$ und σ der Spaltenvektor der σ_i .

Damit lassen sich die Summationen ausführen,

$$Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \frac{1}{\sqrt{\det \beta J}} \int \frac{dH_1}{\sqrt{2\pi}} \dots \frac{dH_N}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i(J)_{ij}^{-1} H_j + \sum_i (H_i + \beta h_i) \sigma_i}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\det \beta J}} \int \frac{dH_1}{\sqrt{2\pi}} \dots \frac{dH_N}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i(J)_{ij}^{-1} H_j} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\sum_i (H_i + \beta h_i) \sigma_i}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N} \det \beta J} \int D[H] e^{-\frac{1}{2\beta} H^T J^{-1} H} e^{-F_{\text{free}}[H + \beta h]}.$$
(2.80)

Hierbei ist

$$e^{-F_{\text{free}}[H+\beta h]} = \prod_{i=1}^{N} 2\cosh(H_i + \beta h_i) \equiv Z_{\text{free}}[H+\beta h]$$
(2.81)

die Zustandssumme des Spinsystems ohne Wechselwirkungen der Spins, d.h. für J = 0.

Das lässt jetzt folgende Sichtweise zu: Die Zustandssumme Z des wechselwirkenden Systems, ist ein Mittelwert der Zustandssumme Z des wechselwirkungsfreien Systems, wobei an jedem Gitterplatz zusätzlich zum festen äusseren Magnetfeld h_i ein **fluktu**ierendes Magnetfeld H_i/β wirkt. Über alle diese fluktuierenden Felder H_i wird mit einem Gaußschen 'Gewichtsfaktor' exp $\left[-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij}H_i(J)_{ij}^{-1}H_j\right]$ gemittelt, d.h. integriert, wobei in diesen Gewichtsfaktor die 'Geometrie' des Systems durch die Form der Matrix J eingeht.

¹ Der ganze Ausdruck ist in Wirklichkeit i.A. divergent oder nicht wohldefiniert, denn J ist i.A. nicht positiv definit. Es wird sich aber herausstellen, dass die folgenden Rechnungen trotzdem Sinn machen, denn die problematischen Anteile det βJ kürzen sich bei bestimmten uns interessierenden Größen heraus, z.B. in der Magnetisierung $m_i = \frac{1}{\beta} \partial_{h_i} \ln Z$, vgl. Gl. (2.87).
In Z treten jetzt die Spins σ_i und die Summationen über σ_i nicht mehr auf: durch die Einführung der Integrationen ist der Schritt von einer 'materiellen' Beschreibung (mittels Spins) zu einer Beschreibung durch 'Felder' H_i vollzogen. Anstelle des komplizierten Wechselwirkungsterms hat man jetzt Felder, deren Fluktuationen die Wechselwirkung zwischen den Spins 'vermitteln'. Die Physik ist in beiden Beschreibungen (Z mittels Summen über Spins bzw. mittels Integralen über Felder) exakt dieselbe, nur die Sichtweise ist eine andere, wobei sich die feldtheoretische Beschreibung für viele Zwecke als vorteilhafter erweist.

2.2.2 Erste Analyse der Feldtheorie

Aus der exakten Feldtheorie für die Zustandssumme

$$Z = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N}} \det \beta J} \int D[H] e^{-S[H]}$$
(2.82)
$$S[H] \equiv \frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_{i}(J)_{ij}^{-1} H_{j} - \sum_{i} \ln 2 \cosh(H_{i} + \beta h_{i})$$
(2.83)

gewinnen wir zunächst die Weiss'sche Molekularfeld-Näherung (Mean-Field). Dazu wird das Integral näherungsweise berechnet. Der Hauptbeitrag in der Integration kommt von Feldwerten H_i in der Nähe des Minimums \bar{H}_i von S[H] (**Sattelpunktsmethode**). Das Minimum bestimmt sich aus

$$0 = \frac{\partial S}{\partial H_i} \rightsquigarrow \frac{1}{2\beta} \sum_j \left((J)_{ij}^{-1} \bar{H}_j + \bar{H}_j (J)_{ji}^{-1} \right) - \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i) = 0$$
(2.84)
$$0 = \frac{1}{2\beta} \sum_{ii} \left(J_{ik} (J)_{ij}^{-1} \bar{H}_j + \bar{H}_j (J)_{ji}^{-1} J_{ik} \right) - \sum_i J_{ik} \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i), \quad J_{ik} = J_{ki},$$

wir erhalten also

$$\frac{1}{\beta}\bar{H}_k = \sum_i J_{ik} \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i).$$
(2.85)

In dieser Sattelpunktsnäherung ist die Zustandssumme jetzt

$$Z \to Z_{\rm SP} = e^{-\beta F_{\rm SP}}, \quad \beta F_{\rm SP} \equiv S[\bar{H}_i].$$
 (2.86)

Damit können wir jetzt z.B. die Magnetisierung m_i am Gitterplatz i,

$$m_i = \langle \sigma_i \rangle = \frac{\frac{\partial Z}{\partial \beta h_i}}{Z} = \frac{1}{\beta} \partial_{h_i} \ln Z = -\frac{\partial F}{\partial h_i}$$
(2.87)

in Sattelpunktsnäherung ausrechnen,

$$m_{i} = -\frac{\partial S}{\partial \beta h_{i}} = -\frac{\partial S}{\partial \bar{H}_{i}} \frac{\partial H_{i}}{\partial \beta h_{i}} + \frac{\partial}{\partial \beta h_{i}} \sum_{i} \ln 2 \cosh(\bar{H}_{i} + \beta h_{i})$$
(2.88)
$$= -0 + \frac{\partial}{\partial \bar{H}_{i}} \sum_{i} \ln 2 \cosh(\bar{H}_{i} + \beta h_{i}) = \tanh(\bar{H}_{i} + \beta h_{i}) = \tanh(\beta \sum_{i} L_{i}m_{i} + \beta h_{i})$$

0.7

$$= 0 + \frac{\partial}{\partial\beta h_i} \sum_i \ln 2 \cosh(\bar{H}_i + \beta h_i) = \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i) = \tanh(\beta \sum_j J_{ij} m_j + \beta h_i),$$

wobei wir im letzten Schritt $\frac{1}{\beta}\bar{H}_k = \sum_i J_{ik} \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i) = \sum_i J_{ik} m_i$ und wieder $J_{ik} = J_{ki}$ benutzen. Wir haben damit wieder die Weiss'sche Molekularfeld-Näherung, d.h. die Mean-Field-Methode, erhalten, diesmal sogar verallgemeinert auf beliebige (nicht notwendig konstante) äussere Magnetfelder h_i . Zusammenfassend

$$\frac{1}{\beta}\bar{H}_i = m_i = \tanh(\beta \sum_j J_{ij}m_j + \beta h_i). \quad (2.89)$$

Das erste Gleichheitszeichen gibt hierbei die Mean-Field-Magnetisierung m als Sattelpunktwert des fluktuierenden Feldes H/β an. Anders ausgedrückt läuft das exakte Integral Gl. (2.82) über alle möglichen Konfigurationen (Werte) H_i/β von Magnetisierungen, von denen $\frac{1}{\beta}\bar{H}_i = m_i$ die wichtigste zu sein scheint.

In einem weiteren Schritt schreiben wir jetzt den Anteil $S_0 \equiv \frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i(J)_{ij}^{-1} H_j$ in Gl. (2.82) für den Fall um, dass sich die Spins auf einem *d*-dimensionalen Gitter mit Gitterkonstante *a* und Gitterplätzen \mathbf{R}_i befinden:

AUFGABE: 1. Zeige mit Hilfe der Fourierdarstellung $H_i = a^d \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi^d)} e^{i\mathbf{R}_i \mathbf{k}} H(\mathbf{k})$, dass sich $S_0[H]$ als

$$S_0 = \frac{a^d}{2\beta} \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} H(\mathbf{k}) \frac{1}{J(\mathbf{k})} H(-\mathbf{k})$$
(2.90)

schreiben lässt.

2. Leite die explizite Form von $J(\mathbf{k})$ für nächste–Nachbar–Wechselwirkung her und zeige, dass sich für $a \to 0$ näherungsweise

$$S_0 = \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2 + \frac{1}{2} r_0(T) (\phi(\mathbf{r}))^2 \right]$$
(2.91)

ergibt, wobei $r_0(T)$ eine Funktion der Temperatur $T = \beta^{-1}$ ist und die Felder $\phi(\mathbf{r})$ proportional zu den Fourier-Rücktransformierten von $H(\mathbf{k})$ sind.

3. Diskutiere, wieso keine höheren Ableitungen von $\phi(\mathbf{r})$ in Gl. (2.91) auftreten.

2.2.3 Landau-Funktional

Wir werden jetzt wieder etwas allgemeiner und kommen auf die Konstruktion eines Landau-Funktionals zurück. Das Funktional S[H] in Gl. (2.82) ist offensichtlich bereits ein guter Anhaltspunkt, denn zumindest gibt das Minimieren dieses Funktionals die richtige Mean-Field-Gleichung. Der Ausdruck Gl. (2.91) zeigt uns bereits, dass offensichtlich auch Ableitungen des Feldes $\phi(\mathbf{r})$ eingehen müssen. In Gl. (2.91) ist mit S_0 nur der in $\phi(\mathbf{r})$ quadratische Anteil beschrieben. Die Entwicklung des Terms $\sum_i \ln 2 \cosh(H_i + \beta h_i)$, vgl. Gl. (2.82), wird dann zu höheren Termen in $\phi(\mathbf{r})$ führen. Ohne Magnetfeld (also für h = 0) sollten aus Symmetriegründen wieder nur in $\phi(\mathbf{r})$ gerade Terme auftreten. Wir gehen bis zur vierten Ordnung (wie in den Beispielen Gl. (2.70)) und definieren

$$L[\phi] \equiv \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2 + \frac{1}{2} r_0(T) (\phi(\mathbf{r}))^2 + \frac{1}{4!} u_0(\phi(\mathbf{r}))^4 - B(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \right]$$
(2.92)

mit Parametern $r_0(T)^2$ und u_0 , wobei wir einen zusätzlichen linearen Term mit ortsabhängigen Magnetfeld $B(\mathbf{r})$ zulassen.

Jetzt stellen sich zwei Fragen: 1. Was beschreiben die Felder $\bar{\phi}(\mathbf{r})$, für die $L[\phi]$ minimiert wird, und 2. was soll (außer Minimieren) eigentlich mit dem Funktional $L[\phi]$ gemacht werden? Der zweite Punkt beantwortet sich zwangsläufig, wenn wir an unser Ising-Beispiel Gl. (2.82) zurückdenken: Offensichtlich wird durch Integration über alle Werte von $\phi(\mathbf{r})$ eine Zustandssumme definiert. Wir schreiben diese also zunächst formal als

$$Z = \int D[\phi] \exp\left(-L[\phi]\right), \qquad (2.93)$$

Die Bedeutung der Funktionalintegration $\int D[\phi]$ wird hier klar, wenn man gewissermassen alles wieder rückgängig macht und aus dem Funktional $L[\phi]$ eine Funktion mit endlich vielen $(N < \infty)$ diskreten Variablen ϕ_i anstatt eines kontinuierlichen Feldes ϕ_i macht: dann wird $\int D[\phi] = \mathcal{N} \int d\phi_1 \dots d\phi_N$ mit einer bei dieser Rückführung eventuell auftretenden Normierungskonstante.

Zur ersten Frage oben führen wir die Minimierung von $L[\phi]$ erst einmal aus, was (ANHANG) auf die Euler-Lagrange-Gleichungen der Form

$$-\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + r_0(T)\phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{3!}u_0\phi^3(\mathbf{r}) - B(\mathbf{r}) = 0$$
(2.94)

führt. Für den homogenen Fall können wir z.B. die Parameter durch Vergleich mit Gl. (2.70) identifizieren, $u_0 = 2$, $r_0(T) = t \equiv T/T_c - 1$, und $B = \beta h$ (Magnetfeld). Wichtig ist, dass der Koeffizient r_0 vor dem quadratischen Term bei T_c sein Vorzeichen wechselt. ³ Wegen unserer Vorarbeit (Diskussion um Gl. (2.70)) ist somit also klar, dass unser Landau–Funktional den Mean–Field Phasenübergang beim Isingmodell korrekt beschreibt.

Mit dem Landau-Funktional Gl. (2.92) und der entsprechenden Zustandssumme ist der Übergang von einer statistischen Mechanik mit Gittermodellen zu einer statistischen Mechanik als Feldtheorie vollzogen. Wie gut ist die Beschreibung von Phänomenen der statistischen Mechanik durch eine Feldtheorie? Letztere entsteht im Beispiel des Isingmodells auf dem Gitter durch eine Approximation, bei der höhere Fourierkomponenten vernachlässigt werden (s. Aufgabe oben). Die Feldtheorie stellt also eine geglättete Version der Theorie dar, bei der man sich vorstellen kann, das über Gitterspins σ_i gemittelt

² Wegen des quadratischen Terms aus der Entwicklung von $\sum_i \ln 2 \cosh(H_i)$ würde sich das bei einer mikroskopischen Ableitung aus S[H], Gl. (2.82) dann von dem $r_0(T)$ in Gl. (2.91) unterscheiden.

³ In der Sprache der nichtlinearen Dynamik ist r_0 der Kontrollparameter für die bei $r_0 = 0$ auftretende Stimmgabel-Bifurkation (für homogenes $\phi(\mathbf{r}) = \phi$).

wird. Wollte man das 'von Hand' ausführen, könnte man Größen wie

$$\phi(\mathbf{x}) \equiv \sum_{i} \sigma_{i} g(\mathbf{x} - \mathbf{R}_{i})$$
(2.95)

mit einer geeigneten Glättungsfunktion g (z.B. eine Gaußkurve um den Gitterpunkt \mathbf{R}_i) definieren. Die Hoffnung ist, dass nun zumindest für Phasenübergänge in der Nähe des kritischen Punktes die konkrete Form der Glättungsvorschrift keine Rolle mehr spielt und man deshalb gleich mit einer Theorie in der Form Gl. (2.92) beginnen kann. Entscheidend ist, dass Symmetrien in der Wahl von $L[\phi]$ berücksichtigt bleiben wie z.B. die Ising-Symmetrie $L[\phi] = L[-\phi]$ für $\mathbf{B} = 0$.

AUFGABE: Studiere die Ginsburg-Landau-Theorie der Supraleitung.

2.3 Gaußsche Flukuationen

Die bisherige Mean–Field–Theorie läßt sich sehr einfach zusammenfassen als die Sattelpunktsnäherung des Integrals

$$Z = \int D[\phi] \exp\left(-L[\phi]\right) \approx \exp\left(-L[\bar{\phi}]\right)$$
(2.96)

durch die Sattelpunktslösung (Mean–Field–Lösung) $\bar{\phi}(\mathbf{r})$ in der kontinuierlichen bzw. $\bar{\phi}_j$ in der disktretisierten Theorie. Die Gaußschen Flukuationen sind eine Verbesserung dieser Approximation durch Berücksichtigung der quadratischen Terme bei der Entwicklung von $L[\phi]$ um den Sattelpunkt gemäß

$$L[\phi] = L[\bar{\phi}] + \frac{1}{2!} \sum_{ij} \phi_i L_{ij}'' \phi_j + \dots, \qquad (2.97)$$

wobei die höheren Terme in der $Gau\betaschen N\"{a}herung$ wegelassen werden.

2.3.1 Gaußsche Flukuationen im Ising-Modell

Die physikalische Bedeutung von Gl. (2.97) liegt darin, dass sich damit Korrelationsfunktionen und tatsächliche Fluktuationen (z.B. der Magnetisierung im Isingmodell) berechnen lassen. Solche Spin–Fluktuationen werden zunächst über Wahrscheinlichkeits(W)– Dichten

$$p(\sigma_1, ..., \sigma_N) = \frac{e^{-\beta H[\sigma_j]}}{Z}$$
(2.98)

und reduzierte Zwei-Spin-(W)-Dichten

$$p(\sigma_i, \sigma_k) = \sum_{\sigma_l; l \neq i, k} p(\sigma_1, ..., \sigma_N)$$
(2.99)

bestimmt ⁴ Aus $p(\sigma_1, ..., \sigma_N) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$ kann man im Prinzip alle Vielteilchen-Korrelationen bestimmen, was für wechselwirkende Systeme allerdings in der Praxis sehr schwierig ist, da man 1. die Zustandssumme Z nicht berechnen kann, und 2. die entsprechenden Summationen über $e^{-\beta H}$ schwer durchzuführen sind. Man beschränkt sich deshalb häufig auf die niedrigsten Momente bzw. Kumulanten, die meist auch direkte physikalische Bedeutung haben.

Die Zwei-Teilchen-Korrelation des Ising–Models im thermischen Gleichgewicht folgt aus

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta h_i \partial \beta h_j} Z, \quad Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\frac{1}{2}\beta \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \beta \sum_i h_i \sigma_i}, \quad (2.100)$$

denn die partiellen Ableitungen geben gerade die Terme $\sigma_i \sigma_j$ in der Berechnung des Erwartungswertes. Mit unserer Integraldarstellung

$$Z = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det \beta J}} \int D[H] e^{-S[H]}, \quad S[H] \equiv \frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i(J)_{ij}^{-1} H_j - \log Z_{\text{flee}}.101)$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial\beta h_i\partial\beta h_j} Z_{\text{free}} = \frac{\partial^2}{\partial\beta h_i\partial\beta h_j} \prod_{k=1}^N 2\cosh(H_k + \beta h_k)$$
$$= \tanh(H_i + \beta h_i) \tanh(H_j + \beta h_j) Z_{\text{free}}, \quad i \neq j \qquad (2.102)$$

folgt

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\mathcal{H}] \tanh(H_i + \beta h_i) \tanh(H_j + \beta h_j) e^{-S[H]}}{\int \mathcal{D}[\mathcal{H}] e^{-S[H]}}$$
(2.103)

Wenn wir diesen Ausdruck jetzt nur in Mean-Field-Näherung auswerten, d.h.durch Ersetzen des

$$H_{i} = H_{i}, \quad \tanh(H_{i} + \beta h_{i}) = \tanh(H_{i} + \beta h_{i}) = m_{i}$$

$$\rightsquigarrow \langle \sigma_{i}\sigma_{j} \rangle = m_{i}m_{j} = \langle \sigma_{i} \rangle \langle \sigma_{j} \rangle, \qquad (2.104)$$

d.h. der Erwartungswert des Produktes faktorisiert in das Produkt der Erwartungswerte und die **Flukuationen**

$$\langle \delta \sigma_i \delta \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = 0.$$
(2.105)

Hierbei ist \overline{H}_i der Sattelpunkt des Integrals, der ja gerade zur Mean-Field-Lösung führte. In Mean-Field-Näherung sind alle Flukuationen (Zweiteilchen-Korrelationen) Null, was natürlich unrealistisch ist.

⁴ Analog ist die (reduzierte) W-Verteilung für den Spin σ_1 am Gitterplatz 1 $p(\sigma_1) = \sum_{\sigma_2...\sigma_N} p(\sigma_1,...,\sigma_N) = \sum_{\sigma_2...\sigma_N} \frac{e^{-\beta H}}{Z}$, d.h. die gesamte W-Verteilung wird über alle Spins bis auf Spin 1 summiert, so dass nur noch die Information über Spin 1 übrig beibt. Für $p(\sigma_1)$ kann man jetzt Momente definieren, z. B. $\langle \sigma_1^n \rangle \equiv \sum_{\sigma_1} \sigma_1^n p(\sigma_1)$ etc.

Um das zuverbessern, muss man die oben erwähnte quadratische Entwicklung von ${\cal S}[H]$ durchführen. Wir schreiben

$$H_i \equiv \bar{H}_i + \phi_i, \quad S[\bar{H} + \phi] = S[\bar{H}] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial \bar{H}_i \partial \bar{H}_j} S[\bar{H}] \phi_i \phi_j + \dots$$
(2.106)

Die Matrix der zweiten Ableitungen ist

$$A_{ij} \equiv \frac{\partial^2}{\partial \bar{H}_i \partial \bar{H}_j} S[\bar{H}] = \frac{1}{2\beta} \left[J_{ij}^{-1} + J_{ji}^{-1} \right] - \frac{\delta_{ij}}{\cosh^2(\bar{H}_i + \beta h_i)} \\ = \frac{1}{\beta} J_{ij}^{-1} - (1 - m_i^2) \delta_{ij}, \qquad (2.107)$$

denn die Inverse einer symmetrischen Matrix ist wieder symmetrisch, und wir haben wieder

$$m_i = \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i) = \langle \sigma_i \rangle_{\rm MF} \tag{2.108}$$

benutzt. Damit folgt in unserer Näherung (quadratische Entwicklung um MF)

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{e^{-S[H_i]} \int \mathcal{D}[\phi] \tanh(\bar{H}_i + \phi_i + \beta h_i) \tanh(\bar{H}_j + \phi_j + \beta h_j) e^{-S''[\phi]}}{e^{-S[\bar{H}_i]} \int \mathcal{D}[\phi] e^{-S''[\phi]}} (2.109)$$

Wir entwickeln entsprechend die tanh-Terme,

$$\tanh(\bar{H}_i + \phi_i + \beta h_i) = \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i) + [1 - \tanh^2(\bar{H}_i + \beta h_i)]\phi_i + \dots$$

= $m_i + (1 - m_i^2)\phi_i + \dots,$ (2.110)

und erhalten (AUFGABE)

$$\langle \delta \sigma_i \delta \sigma_j \rangle = (1 - m_i^2)(1 - m_j^2) \langle \phi_i \phi_j \rangle$$

$$\langle \phi_i \phi_j \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\phi] \phi_i \phi_j e^{-S''[\phi]}}{\int \mathcal{D}[\phi] e^{-S''[\phi]}}, \quad S''[\phi] \equiv \frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i A_{ij} \phi_j.$$

$$(2.111)$$

Für die Berechnung nehmen wir ein periodisches Gitter in d Dimensionen mit Gitterkonstante a an und benutzen wir das Gauß-Integral aus dem Anhang und Fourierzerlegung,

$$G_{\phi}(\mathbf{R}_{i} - \mathbf{R}_{j}) \equiv \langle \phi_{i}\phi_{j} \rangle = \frac{v}{(2\pi)^{d}} \int_{C} d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{i} - \mathbf{R}_{j})} \tilde{G}_{\phi}(\mathbf{k}).$$
(2.112)

Weiterhin schreiben wir für homogenes $m_i = m$ die Matrix A in der quadratischen Form

 $S''[\phi]$ als Fourier integral (Notation $\int_{\bf k}\equiv \frac{v}{(2\pi)^d}\int_C d{\bf k}$ zur Abkürzung),

$$S''[\phi] \equiv \frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i A_{ij} \phi_j =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} \int_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \left[\frac{1}{\beta} J_{ij}^{-1} - (1-m^2)\delta_{ij}\right] \phi(\mathbf{k})\phi(\mathbf{k}')$$

$$= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[\frac{1}{\beta J(-\mathbf{k})} - (1-m^2)\right] \frac{(2\pi)^d}{a^d} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\phi(\mathbf{k})\phi(\mathbf{k}')$$

$$= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{\beta J(-\mathbf{k})} - (1-m^2)\right] \phi(\mathbf{k})\phi(-\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \phi(\mathbf{k})A(\mathbf{k})\phi(-\mathbf{k}).(2.113)$$

Dann folgt aus Gl. (B.9), $\tilde{G}_{\phi}(\mathbf{k}) = 1/A(\mathbf{k})$, explizit

$$\tilde{G}_{\phi}(\mathbf{k}) = \left[\frac{1}{\beta J(-\mathbf{k})} - (1 - m^2)\right]^{-1}, \quad J(\mathbf{k}) \equiv \sum_{i} J_{1i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}.$$
(2.114)

2.3.2 Die Exponenten ν und η

Wir berechnen die Korrelationsfunktion $G_{\phi}(\mathbf{r})$ direkt durch Übergang zum Kontinuumslimes $a \to 0$. Wir können hierzu $\frac{1}{\beta J(-\mathbf{k})}$ entwickeln (OE $\mathbf{R}_1 = 0$) mit

$$J(\mathbf{k}) \equiv \sum_{i} J_{1i} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{i}} = \sum_{i} J_{1i} \left(1 + i\mathbf{k}\mathbf{R}_{i} - \frac{1}{2} \left(\mathbf{k}\mathbf{R}_{i}\right)^{2} + \dots \right).$$
(2.115)

Für nächste-Nachbar-Wechselwirkung $J_{1i} = J\delta_{1,i(NN)}$ hat man direkt

$$J(\mathbf{k}) = 2J \sum_{\alpha=1}^{d} \cos \mathbf{k} \mathbf{a}_{\alpha} = 2dJ - J \sum_{\alpha=1}^{d} (\mathbf{k} \mathbf{a}_{\alpha})^{2} + \dots = 2dJ - Jk^{2}a^{2} + \dots$$
(2.116)

wobe
i \mathbf{a}_{α} die d Basis-Vektoren der Länge as
ind. Die kritische Temperatur in MF-Näherung war $T_c = \mathcal{J} \equiv \sum_{1j} J_{ij} = 2dJ$. Damit folgt

$$\tilde{G}_{\phi}(\mathbf{k}) = \left[\frac{1}{\beta(2dJ - Jk^{2}a^{2} + ...)} - (1 - m^{2})\right]^{-1} \\
= \frac{T_{c}}{T\left[1 - \frac{T_{c}}{T}(1 - m^{2}) + k^{2}a^{2}/2d + O(k^{4})\right]} \\
\approx \frac{2dT_{c}/Ta^{2}}{\kappa^{2} + k^{2}}, \quad \kappa^{2} \equiv \frac{2d}{a^{2}}\left(1 - \frac{T_{c}}{T}(1 - m^{2})\right). \quad (2.117)$$

Wir transformieren dieses wichtige Ergebnis in den Ortsraum zurück. In d = 3 Dimensionen wird das

$$G_{\phi}(r) \propto \frac{e^{-r/\xi}}{r}, \quad r \to \infty, \quad \xi = \kappa^{-1}, \quad \text{Korrelationslänge} .$$
 (2.118)

Das führt zu einer wichtigen Interpretation: die Korrelationen zwischen Spins mit Abstand R zerfallen exponentiell auf der Längenskala ξ . Bei Annäherung an den kritischen Punkt von hohen Temperaturen, $T \to T_c$, divergiert diese Korrelationslänge. Für $T > T_c$ ist der Ordnungsparameter m = 0, und mit $t \equiv T/T_c - 1$ finden wir für $t \to 0^+$ das Verhalten $\kappa^2 \approx \frac{2d}{a^2} t^{-5}$ und damit

$$\xi \propto t^{-\nu}, \quad t \to 0. \tag{2.119}$$

Hierbei haben wir den kritischen Exponenten ν für die Divergenz der Korrelationslänge bei Annäherung an den kritischen Punkt definiert. Er hat hier also den Wert $\nu = \frac{1}{2}$.

Die Korrelationen zerfallen am kritischen Punkt nicht mehr exponentiell, sondern algebraisch

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad T = T_c, \quad \text{Def. des krit. Exponenten } \eta \ . \ (2.120)$$

Hier kommt der zweite wichtige kritische Exponent, nämlich die Größe η , ins Spiel. In unserer Mean-Field-Theorie mit Gaußschen Flukuationen bekommen wir offensichtlich

$$\eta = 0$$
, MF+Fluktuationen (2.121)

2.3.3 Die Korrelationsfunktion als Greensche Funktion

Wir diskutieren eine zweite Möglichkeit, die Korrelationsfunktion zu berechnen.

Wir betrachten hierzu die Änderung der Magnetisierung am Ort $i, \delta \langle \sigma_i \rangle$, wenn sich die Magnetfelder h_j um δh_i ändern,

$$\delta\langle\sigma_i\rangle \equiv \langle\sigma_i\rangle_{h+\delta h} - \langle\sigma_i\rangle_h \equiv \sum_j \chi_{ij}\delta h_j, \quad \chi_{ij} \equiv \frac{\delta\langle\sigma_i\rangle}{\delta h_j}, \quad (2.122)$$

wobei χ_{ij} als **Response-Funktion** oder verallgemeinerte Suszeptibilität bezeichnet wird, da sie die 'Antwort' des Systems(in Form einer Änderung der Magnetisierung) auf eine externe Störung in linearer Ordung in dieser Störung beschreibt.

⁵ Für $T < T_c$ ist der Ordnungsparameter endlich mit $m = m_0 |t|^{\frac{1}{2}}$, und für $t \to 0^-$ gilt würde κ^2 in dieser Entwicklung negativ werden (CHECK): man muss die höheren Terme k^4 etc. mitnehmen, und die einfache Form Gl. (2.117) gilt nicht mehr.

Die Response-Funktion χ_{ij} kann nun durch die Fluktuationen *in Abwesenheit der* Störung ausgedrückt werden,

$$\begin{split} \delta\langle\sigma_i\rangle &\equiv \langle\sigma_i\rangle_{h+\delta h} - \langle\sigma_i\rangle_h = \sum_j \frac{\partial\langle\sigma_i\rangle}{\partial h_j} \delta h_j = \sum_j \frac{\partial}{\partial h_j} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta h_i} \delta h_j \\ &= \sum_j \left[\frac{-\beta}{Z^2} \frac{\partial Z}{\partial h_j} \frac{\partial Z}{\partial h_i} + \frac{\beta}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta h_i \beta \partial h_j} \right] \delta h_j \\ &= \sum_j \beta \left[\langle\sigma_i \sigma_j\rangle - \langle\sigma_i\rangle \langle\sigma_j\rangle \right] \delta h_j = \sum_j \beta \langle\delta\sigma_i \delta\sigma_j\rangle \delta h_j, \end{split}$$
(2.123)

es gilt also

$$\chi_{ij} = \beta \langle \delta \sigma_i \delta \sigma_j \rangle = \beta G(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j), \quad \text{Flukuations-Dissipations-Theorem} . \quad (2.124)$$

Damit ist uns die Möglichkeit gegeben, die Korrelationsfunktion aus der Änderung der mittleren Magnetisierung m_i mit dem Magnetfeld h_j zu berechnen, nämlich als $G(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = k_B T \frac{\delta(\sigma_i)}{\delta h_j}$.

Weiterhin besteht der Zusammenhang mit der isothermen Suszeptibilität χ_T der Thermodynamik: für ein homogenes Magnetfeld h (wieder OE $\mathbf{R}_1 = 0$),

$$\chi_T \equiv \frac{\partial M}{\partial h} = \sum_i \frac{\partial \langle \sigma_i \rangle}{\partial h} = \sum_i \chi_{i1} = \beta \sum_i G(\mathbf{R}_i) = \beta \tilde{G}(\mathbf{k} = 0).$$
(2.125)

Bei Annäherung an T_c finden wir wegen der Definition des Exponenten γ in $\chi_T \propto |t|^{-\gamma}$, Gl. (1.60), den Zusammenhang

$$\int d\mathbf{r} G(\mathbf{r}) = \tilde{G}(\mathbf{k} = 0) \propto |t|^{-\gamma}.$$
(2.126)

In unserem Modell folgt mit $\tilde{G}(\mathbf{k}=0) \propto \kappa^{-2} = \xi^2 \propto t^{-2\nu}$, also $2\nu = \gamma$, was mit unseren vorherigen Ergebnissen $\nu = \frac{1}{2}$, Gl. (2.119), und $\gamma = 1$, Gl. (1.65), konsistent ist.

Häufig geht man hier auch wieder zur kontinuierlichen Version über und schreibt

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = k_B T \frac{\delta m(\mathbf{r})}{\delta h(\mathbf{r}')}.$$
 (2.127)

Der Vorteil besteht darin, dass wir damit $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ berechnen können, ohne direkt ein (potentiell kompliziertes) Gaußsches Integral berechnen zu müssen. In der Landau-Theorie Gl. (2.93) für das Ising-Modell erhalten wir aus der Sattelpunktsgleichung, vgl. Gl. (2.94),

$$-\nabla^2 m(\mathbf{r}) + r_0(T)m(\mathbf{r}) + \frac{1}{3!}u_0m^3(\mathbf{r}) = \beta h(\mathbf{r})$$
(2.128)

mit der Magnetisierung $m(\mathbf{r})$ und dem Magnetfeld $h(\mathbf{r})$, mit Koeffizienten $r_0(T)$ sowie $u_0 > 0$. Das Ausführen der Differentiation in Gl. (2.127) liefert die Bewegungsgleichung

$$-\nabla^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \left[r_0(T) + \frac{1}{2} u_0 m^2(\mathbf{r}) \right] G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$
(2.129)

Im Sinne der linearen Antwort auf das Magnetfeld ist $m(\mathbf{r}) = m$ hier die homogene Magnetisierung ohne Magnetfeld h = 0, also m = 0 in der symmetrischen (paramagnetischen) Phase und $m = m_0 \neq 0$ in der spontan Symmetrie-gebrochenen, ferromagnetischen Phase. Damit können wir die Bewegungsgleichung sofort durch Fouriertransformation lösen;

$$\tilde{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\mathbf{k}^2 + \kappa^2}, \quad \kappa^2 \equiv r_0(T) + \frac{1}{2}u_0m^2.$$
(2.130)

Hier ist κ^2 jetzt explizit positiv.

AUFGABE: Bestätige aus der obigen Form für κ^2 den Exponenten $\nu = \frac{1}{2}$ für die Divergenz der Lokalisierungslänge sowohl für $T > T_c$ als auch für $T < T_c$.

2.3.4 Korrekturen zur freien Energie

Wir wollen hier die freie Energie F aus der Zustandssumme Z eines Landau–Funktionalintegrals von Typ Gl. (2.93) in Sattelpunktsnäherung plus quadratische Fluktuationen berechnen. Wir schreiben also

$$e^{-\beta F} = \int D[\phi] e^{-L[\phi]} \approx e^{-L[\bar{\phi}]} \int D[\phi] e^{-L''[\phi]}, \quad L''[\phi] = \frac{1}{2!} \sum_{ij} \phi_i L''_{ij} \phi_j. (2.131)$$

In dieser noch diskreten Version (mit $D[\phi] \equiv d\phi_1...d\phi_N$) ist das Ergebnis der Gauß-Integration einfach durch die Determinante der Matrix L'' gegeben, und in dieser quadratischen Näherung gilt

$$e^{-\beta F} \approx e^{-L[\bar{\phi}]} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det L''}}.$$
 (2.132)

Wir können die Determinante über die Spur ausdrücken gemäß

$$\det A = \exp\left(\operatorname{Tr}\log A\right) \tag{2.133}$$

für Operatoren A, die sich spektral zerlegen (diagonalisieren) lassen. Wenn wir den für die freie Energie trivialen Faktor $(2\pi)^N$ oben weglassen, haben wir also $-\beta F = -L[\phi] - \frac{1}{2}\log \det L''$ oder mit $\beta^{-1}L[\phi] \equiv \bar{F}$ die Darstellung

$$F = \bar{F} + \frac{1}{2}k_B T \operatorname{Tr} \log L''.$$
(2.134)

Als Aufgabe bleibt also die konkrete Berechnung der Determinante von L'' bzw. der spektralen Zerlegung von L''. Wegen $L''_{ij} = G_{ij}^{-1}$ mit

$$G_{ij} \equiv \frac{\int D[\phi]\phi_i \phi_j e^{-S''[\phi]}}{\int D[\phi] e^{-S''[\phi]}}$$
(2.135)

wird die Korrektur also durch die Korrelationsfunktion (Greensche Funktion) G bestimmt, d.h.

$$F = \overline{F} - \frac{1}{2}k_B T \operatorname{Tr} \log G. \qquad (2.136)$$

Konkret ist mit der Fourierdarstellung von G und der Spur einer Matrix im Fourierraum, Gl. (A.15),

$$F = \bar{F} - \frac{1}{2} k_B T N \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k} \log \tilde{G}(\mathbf{k}).$$
(2.137)

Wir können hier z.B. konkret die Greensche Funktion Gl. (2.130) einsetzen und erhalten

$$F = \bar{F} + \frac{1}{2}k_B T N \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k} \log(\mathbf{k}^2 + \kappa^2), \quad \kappa^2 \equiv r_0(T) + \frac{1}{2}u_0 m^2.$$
(2.138)

AUFGABE: Berechne ausgehend von Gl. (2.138) die Korrektur zur mittleren Magnetisierung pro Gitterplatz (bezeichnet durch den Mean-Field–Wert m) durch die Gaußschen Fluktuationen, sowie den kritischen Exponenten β in Mean-Field mit Gaußschen Fluktuationen.

Als zweites konkretes Beispiel nehmen wir das Ising–Modell in der Darstellung, wo wir bereits bis zur zweiten Ordnung entwickelt hatten,

$$e^{-\beta F} \approx e^{-S[\bar{\phi}]} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det \beta J}} \int D[\Phi] e^{-S''[\Phi]}.$$
 (2.139)

Wir haben also $L''[\phi] = S''[\phi]$. Wegen $L''_{ij} = A_{ij} = G_{ij}^{-1}$ ist die Fluktuations-Determinante also im Wesentlichen durch die Greensche Funktion (Korrelationsfunktion) G bestimmt, allerdings kommt bei der konkreten Berechnung noch der Vorfaktor det βJ hinzu. Konkret folgt dann die freie Energie F aus

$$e^{-\beta F} \approx e^{-S[\bar{\phi}]} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det \beta J}} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det A}} = e^{-S[\bar{\phi}]} \frac{1}{(2\pi)^N} \frac{1}{\sqrt{\det \beta JA}}, \quad (2.140)$$

und bis auf die triviale Konstante aus dem Faktor $(2\pi)^N$ folgt

$$F = \bar{F} + \frac{1}{2}k_B T \operatorname{Tr} \log \beta J A, \quad (\beta J A)_{ij} = \delta_{ij} - \beta (1 - m_i^2) J_{ij}.$$
(2.141)

2.3.5 Die Divergenz der spezifischen Wärme

Aus der freien Energie Gl. (2.138) können wir die spezifische Wärme berechnen,

$$C \equiv -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = C_{\rm SP} + C_{\rm flue}.$$
 (2.142)

Der uns hier interessierende Anteil ist der von den Gaußschen Fluktuationen,

$$C_{\rm fluc} \equiv \frac{k_B T N}{2} \frac{\partial^2}{\partial T^2} T \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k} \log(\mathbf{k}^2 + \kappa^2), \quad \kappa^2 \equiv \xi^{-2} \equiv k_0^2 t \tag{2.143}$$

mit $t = (T - T_c)/T_c$ und der Korrelationslänge ξ , wobei wir hier $T \ge T_c$ annehmen wollen (für $T < T_c$ äändert sich der Ausdruck für ξ wegen der endlichen spontanen Magnetisierung m.). Das Ausführen der Differentiationen ergibt zwei Terme,

$$C_{\rm fluc} = k_B T N \left(\frac{-k_0^2}{T_c} \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C \frac{d\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2 + \xi^{-2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{k_0^2}{T_c} \right) \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C \frac{d\mathbf{k}}{(\mathbf{k}^2 + \xi^{-2})^2} \right). \quad (2.144)$$

Wie immer laufen die Integrale über die erste Brillouin-Zone, und wir definieren zur weiteren Diskussion

$$C_{\text{fluc}} = k_B T N \left(c_1 I_1(\xi) + c_2 I_2(\xi) \right)$$
(2.145)

mit der Definition

$$I_n(\xi) \equiv \int_0^\Lambda \frac{dkk^{d-1}}{(k^2 + \xi^{-2})^n},$$
(2.146)

wobei wir die **k**-Integrale mit Polarkoordinaten vereinfacht haben und $\Lambda \sim 1/a$ die Grenze der Brillouin-Zone als die inverse Gitterkonstante *a* bezeichnet. Die Konstanten $c_{1,2}$ enthalten hier auch die (harmlosen) Winkelintegrationen aus den **k**-Integralen, so dass alles Wesentliche bei der Annäherung an den kritischen Punkt T_c (wo ξ divergiert) in den $I_n(\xi)$ steckt.

(GOLDENFELD) Tatsächlich hängt das Verhalten der $I_n(\xi)$ auch stark von der Dimension *d* ab: bei Annäherung an den kritischen Punkt haben wir

$$I_n(\xi \to \infty) = \int_0^{\Lambda} dk k^{d-1-2n}, \quad \text{endlich für } d-1-2n > -1 , \qquad (2.147)$$

also bleibt $I_n(\infty)$ endlich für d > 2n.

Für den umgekehrten Fall d < 2n divergieren die I_n für $\xi \to \infty$, was wir durch Umskalieren $(q \equiv \xi k)$ beschreiben können;

$$I_n(\xi) = \xi^{2n-d} \int_0^{\xi\Lambda} \frac{dqq^{d-1}}{(1+q^2)^n} \to \xi^{2n-d} \int_0^\infty \frac{dqq^{d-1}}{(1+q^2)^n} = \alpha_n \xi^{2n-d}, \qquad (2.148)$$

wobei die Konstante $\alpha_n \equiv \int_0^\infty \frac{dqq^{d-1}}{(1+q^2)^n}$ tatsächlich endlich ist, denn das Integral konvergiert für große q, falls der Integrand schneller als 1/q abfällt, also für d-1-2n < -1 bzw. d < 2n, was wir gerade vorausgesetzt haben.

Für unsere spezifischen Wärme bebnötigen wir I_1 und I_2 . Zunächst divergiert I_2 in d < 4 wie ξ^{4-d} und bleibt endlich in d > 4. Weiterhin divergiert I_1 in d < 2 wie ξ^{2-d} , was aber nicht so stark wie die ξ^{4-d} -Divergenz von I_2 ist und deshalb gegenüber dieser vernachlässigt werden kann. Für d > 2 bleibt I_1 schließlich endlich.

Da die (mögliche) Divergenz der spezifischen Wärme aus dem Fluktuationsanteil C_{fluc} (und nicht dem Anteil C_{SP} aus der Sattelpunktsnäherung) stammt, ergibt sich insgesamt also

$$C \propto \xi^{4-d} \propto t^{d/2-2}, \quad d < 4$$

$$\propto 1, \quad d > 4. \tag{2.149}$$

Der entsprechende kritische Exponent α für die Divergenz von C wird damit



Fig. 2.2: (aus M. Kardar, 'Statistical Physics of Fields') Spezifische Wärme in Sattelpunktsnäherung (durchgezogene Linie) und mit Gaußschen Fluktuationen (gestrichelt).

$$\begin{array}{rcl} \alpha &=& 2 - d/2, \quad d \le 4 \\ &=& 0, \quad d \ge 4. \end{array} (2.150)$$

Dieses Verhalten ist noch einmal in der Figur dargestellt. Bemerkenswert hier ist die Tatsache, dass wir zum ersten Mal eine *Dimensionsabhängigkeit* eines kritischen Exponenten finden, und dass sich mit dem Ergebnis Gl. (2.150) ein Wert ergibt, der von dem einfachen Mean-Field-Ergebnis ($\alpha = 0$) abweicht.

Die Dimension $d = d_c = 4$ wird in diesem Zusammenhang als **obere kritische Dimension** des durch Gl. (2.93) definierten Modells bezeichnet. Für Dimensionen $d > d_c$ liefern Korrekturen zur Mean-Field (Landau)–Theorie, d.h. zur Sattelpunktsnäherung, keine wesentliche Änderung des kritischen Verhaltens nahe T_c . Umgekehrt wird für $d < d_c$ die Landau–Theorie offensichtlich in der Nähe von T_c unzuverlässig, als dass sie nicht das korrekte kritische Verhalten beschreibt.

Definition Die obere kritische Dimension d_c eines Modells definiert die räumliche Dimension d, oberhalb derer Korrekturen zur Mean-Field (Landau)–Theorie keine wesentlichen Änderungen des singulären Verhaltens (Änderungen der Exponenten) in der Nähe von T_c ergeben.

2.4 Jenseits von Mean–Field

Die Landau–Theorie sagt als Mean–Field–Theorie z.B. für das Isingmodell in d = 2 die falschen Exponenten voraus. Welche Verbesserungen bringt die Mitnahme der quadratischen Fluktuationen, und überhaupt eine systematische Entwicklung um die Mean–Field–Näherung?

2.4.1 Das Ginsburg–Kriterium

Damit die Mean-Field-Theorie überhaupt eine sinnvolle Näherung ist, sollten wie dort angenommen die Fluktuationen des Ordnungsparameters klein gegenüber dessen Erwartungswert sein. Für das Ising-Modell also $|\langle \delta \sigma_i \delta \sigma_j \rangle| \ll m^2$. Hier wird im Folgenden vorausgesetzt, dass wir in der ferromagnetischen Phase $(T < T_c)$ mit $m \neq 0$ sind. Eine schwächere Bedingung (CHECK) ist

$$\sum_{j} |\langle \delta \sigma_0 \delta \sigma_j \rangle| \ll \sum_{j} m^2, \qquad (2.151)$$

wobei die Summe über ein Volumen V läuft, innerhalb dessen die Spins als korreliert bezeichnet werden können. Für $T < T_c$ wird dieses Volumen $V \propto \xi^d$ durch die Korrelationslänge ξ bestimmt, die in der Korrelationsfunktion $G_{\phi}(r)$ auftritt, vgl. zum Beispiel Gl. (2.118) für d = 3 Dimensionen. Mit $G(\mathbf{R}_0 - \mathbf{R}_j) = (1 - m^2)^2 \langle \delta \sigma_0 \delta \sigma_j \rangle$ (homogenes System) wird die Bedingung durch Übergang zum Kontinuumslimes zu

$$g \equiv \frac{(1-m^2)^2 \int_V d^d \mathbf{r} G_\phi(\mathbf{r})}{m^2 \int_V d^d \mathbf{r}} \ll 1.$$
 (2.152)

Benutzen wir jetzt das kritische Verhalten

$$m \propto |t|^{\beta}, \quad \xi \propto t^{-\nu}, \quad \int_{V} d^{d}\mathbf{r} G_{\phi}(\mathbf{r}) \propto \tilde{G}(\mathbf{k}=0) \propto t^{-\gamma}, \quad \int_{V} d^{d}\mathbf{r} \propto \xi^{d} \propto^{-d\nu} \quad (2.153)$$

für $t \equiv (T - T_c)/T_c$, so folgt

$$g \propto \frac{t^{-\gamma}}{t^{2\beta}t^{-d\nu}} = t^{-\gamma - 2\beta d\nu} \ll 1, \quad t \to 0$$
(2.154)

als Kriterium für die innere Konsistenz der Landau-Theorie, also

$$d > \frac{2\beta + \gamma}{\nu}.$$
 (2.155)

Für das Ising-Modell erhalten wir hier wieder $d > d_c = 4$ mit der oberen kritischen Dimension $d_c = 4$. Entscheidend ist hier die Abhängigkeit von der Dimension d. Ohne Proportionalitätskonstanten genau kennen zu müssen, können wir bereits schlußfolgern:

Satz 2. In $d < d_c = 4$ Dimensionen ist die Landau-Theorie (Mean-Field) für das Ising-Modell bei Annäherung an den kritischen Punkt $T \rightarrow T_c$ intern nicht konsistent.

Wie nahe man an die kritische Temperatur herangehen muss, um den Effekt von Fluktuationen (d.h. Korrekturen zur Sattelpunktsnäherung) in d < 4 wirklich zu sehen, hängt vom mikroskopischen Modell, d.h. den Vorfaktoren in den Proportionalitäten wie $\xi \propto |t|^{-\nu}$ etc. ab.

In konventionellen Supraleitern (SKRIPT FESTKÖRPERTHEORIE für BCS-Theorie als Mean-Field-Theorie) in d = 3 ergibt sich hier z.B. die Bedingung |t| < 10-18 (KAR-DAR), was ausser der Reichweite von Experimenten ist.

2.4.2 Scheitern der Störungstheorie für $T \rightarrow T_C$

(GOLDENFELD) Wir schreiben das Landau–Funktional Gl. (2.92) unserer Feldtheorie für die Zustandssumme $Z = \int D[\phi] \exp(-L[\phi])$ mit Hilfe dimensionsloser Größen um;

$$L[\phi] \equiv \int d^{d}\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi)^{2} + \frac{1}{2} r_{0} \phi^{2} + \frac{1}{4!} u_{0} \phi^{4} - B \phi \right] = \int d^{d}\mathbf{x} \left[\frac{1}{2} (\nabla \varphi)^{2} + \frac{1}{2} \varphi^{2} + \frac{1}{4!} \bar{u}_{0} \varphi^{4} - \bar{B} \varphi \right]$$

$$\mathbf{x} \equiv \frac{\mathbf{r}}{l}, \quad \varphi = \frac{\phi}{l^{1-d/2}}, \quad \bar{u}_{0} = \frac{u_{0}}{l^{d-4}}, \quad l \equiv r_{0}^{-\frac{1}{2}}.$$
 (2.156)

Dass $l \equiv r_0^{-\frac{1}{2}}$ eine Länge definiert, können wir z.B. durch Dimensionsvergleich der ersten beiden Terme im Funktional sehen.

AUFGABE: Wie muss \overline{B} hier definiert werden?

Schreibt man jetzt eine Störungstheorie für Z mit $L = L_0 + L_1$ in der Form

$$Z = \int D[\varphi] \exp\left(-L_0\right) \left(1 - L_1 + \frac{1}{2!}L_1^2 + \dots\right), \quad L_1[\varphi] \equiv \frac{1}{4!}\bar{u}_0 \int d^d \mathbf{x} \varphi^4(\mathbf{x}), \quad (2.157)$$

erkennt man, dass \bar{u}_0 der dimensionslose Parameter dieser Störungstheorie ist, d.h. der *n*-te Term iist proportional zu \bar{u}_0^n . Der Parameter $r_0 \propto t \equiv (T - T_c)/T_c$ verschwindet bei Annäherung an den kritischen Punkt, weshalb

$$\bar{u}_0 = u_0 r_0^{(d-4)/2} \propto t^{(d-4)/2} \tag{2.158}$$

in d < 4 Dimensionen divergiert, was kein gutes Zeichen für eine Störungstheorie in \bar{u}_0 ist. An der Bedingung d < 4 erkennen wir hier auch die Konsistenz mit dem oben diskutierten Ginsburg-Kriterium.

Weiterhin kann Z als Funktion von \bar{u}_0 auch nicht analytisch (in eine Potenzreihe entwickelbar) sein, denn dann müsste Z z.B auch für kleine negative \bar{u}_0 existieren, was wegen des quartischen Terms nicht möglich ist.

2.4.3 'Anomale Dimension'

Wir führen eine Dimensionsanalyse der Korrelationsfunktion

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \frac{\int D[\phi]\phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}')e^{-L[\phi]}}{\int D[\phi]e^{-L[\phi]}}$$
(2.159)

durch. Aus Gl. (2.156) erkennen wir, dass G die Dimension $[G] = [\phi^2] = [\varphi^2]l^{2-d} = l^{2-d}$, wobei l die Längeneinheit bezeichnet.

Wir führen jetzt dimensionslose Größen ein;

$$\mathbf{r}_l = \mathbf{r}l^{-1}, \quad G_l(\mathbf{r}_l) = G(\mathbf{r})l^{-2+d} \tag{2.160}$$

wobei jeweils in Einheiten l gemessen wird.

Wenn wir statt l die Längeneinheit $l' \equiv \varepsilon l$ wählen, führt das auf

$$\mathbf{r}_{l'} = \mathbf{r}(\varepsilon l)^{-1} = \varepsilon^{-1} \mathbf{r}_l, \quad G_{l'}(\mathbf{r}_{l'}) = G(\mathbf{r}) l^{-2+d} \varepsilon^{-2+d} = \varepsilon^{-2+d} G_l(\mathbf{r}_l).$$
(2.161)

Jetzt betrachten wir die Definition des kritischen Exponenten η , Gl. (2.120), $G(r) \propto r^{2-d-\eta}$ am kritischen Punkt $T = T_c$. Wir schreiben

$$G_{l'}(\mathbf{r}_{l'}) \propto r_{l'}^{2-d-\eta} = r_l^{2-d-\eta} \varepsilon^{-2+d+\eta} \propto \varepsilon^{-2+d+\eta} G_l(\mathbf{r}_l).$$
(2.162)

Vergleich mit oben würde, völlig unabhängig von einer mikroskopischen Berechnung von G und unabhängig vom Modell, immer das Ergebnis $\eta = 0$ liefern! Das ist sicherlich konsistent mit unserer früheren Berechnung der Korrelationsfunktion aus den Gaußschen Fluktuationen um Mean-Field, wo wir $\eta = 0$ erhalten haben. Allerdings ist der Wert $\eta = 0$ z.B. für das Ising-Modell in d = 2 Dimensionen falsch, wie man aus der exakten Lösung weiss.

Die Auflösung dieses Widerspruchs liegt in der zu laxen Benutzung des Proportionalitätszeichens \propto in $G(r) \propto r^{2-d-\eta}$: aus Dimensionsgründen muss es hier also eine weitere Längenskala geben. Die Korrelationslänge ξ fällt hier als Kandidat weg, da sie bei T_c unendlich wird. Im Landau-Modell oben entspricht das dem Wert $r_0 = 0$ bei t = 0. Was als Längenskala übrigbleibt, ist eine mikroskopische Längenskala des ursprünglichen Gittermodells, d.h. die Gitterkonstante a (oder ein Vielfaches hiervon). Wir setzen also eine Form

$$G(r) = c(r/a)^{2-d-\eta}, \quad T = T_c$$
 (2.163)

mit einer dimensionslosen Konstante c an.

Abseits des kritischen Punktes haben wir z.B. in d = 3 einen exponentiellen Zerfall der Korrelationen $\propto e^{-r/\xi}$ mit der Korrelationslänge ξ . Das Argument im Exponenten ist damit bereits dimensionslos, ξ hat die Dimension einer Länge l, und es sollte für die dimensionslose Korrelationslänge $\xi_l \equiv \xi/l$ wieder

$$\xi_l \equiv \xi l^{-1} = \varepsilon^{-1} \xi \varepsilon l^{-1} = \varepsilon^{-1} \xi_{l'} \tag{2.164}$$

bei einer Umskalierung gelten. Wenn wir ξ durch die Länge $r_0^{-1/2}$ des Landau–Modells ausdrücken wollen, schreiben wir

$$\xi = r_0^{-1/2} f(r_0 a^2), \qquad (2.165)$$

mit einer Funktion f des dimensionslosen Arguments r_0a^2 , so dass Gl. (2.164) immer erfüllt ist. Würde man hier naiv wieder $\xi \propto r_0^{-1/2}$ schreiben, hätte man wegen $r_0 \propto t$ stets die Beziehung $\xi \propto t^{-1/2}$ und wegen der Definition $\xi \propto t^{-\nu}$ des kritischen Exponenten ν immer den Wert $\nu = \frac{1}{2}$, also das (falsche) Mean-Field-Ergebnis.

Die Verwendung einer Skalierung und die Einführung von Skalenfunktionen wie dem obigen f scheint also entscheidend wichtig zu sein, um in der Nähe von T_c nicht in Widersprüche zu geraten. Wir können f oben z.B. für $x \equiv r_0 a^2 \rightarrow 0$ ansetzen als $f(x) = cx^{\theta}$ mit einer numerischen Konstanten c und einem neuen Exponenten θ . Das führt auf

$$\xi \propto t^{-\frac{1}{2}+\theta} a^{2\theta}, \quad t \to 0, \tag{2.166}$$

so dass

$$\nu = \frac{1}{2} - \theta$$
, anomale Dimension θ . (2.167)

Die anomale Dimension θ bezeichnet also die Abweichung des Exponenten ν vom Wert 1/2 aus der Landau–Theorie.

AUFGABE: Wiederhole die Argumente zur Skalierung der Korrelationsfunktion im Fourier–Raum statt im Ortsraum.

3. SKALENTRANSFORMATIONEN UND RENORMIERUNGSGRUPPE

3.1 Homogenitätsannahme

Im Folgenden geht es darum, Ordnung in den 'Zoo' der kritischen Exponenten $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$ zu bringen und das kritische Verhalten durch nur noch zwei Exponenten zu charakterisieren.

(KARDAR) Wieder betrachten wir magnetische Systeme der Ising-Klasse ($Z_2 - Symmetrie$) mit freier Energie F(t, h) (reduzierte Temperatur t und Magnetfeld h). Im h - t-Diagramm ist die negative t-Achse die Koexistenzlinie (für 1. Ordnung Phasenübergänge), die bei t = 0 (2. Ordnung Phasenübergang) terminiert (SKIZZE). Aus f(h, t) muss das kritische Verhalten z.B. der Suszeptibilitäten oder Wärmekapazitäten folgen.

Die Homogenitätsannahme für die freie Energie (von der wir uns im Folgenden immer alle unkritischen Anteile abgezogen denken) besteht in einem Ansatz für die Funktion F(t, h) in der Form

$$F(t,h) = |t|^{2-\alpha} g_F(h/|t|^{\Delta})$$
(3.1)

mit nur noch zwei Exponenten α und Δ (auf die man alle anderen Exponenten zurückzuführen hofft) und einer Skalenfunktion $g_F(x)$ von nur noch einer Variablen x.

Homogenität von Funktionen ist uns bereits in der Thermodynamik (SKRIPT) begegnet, wo z.B die Entropie S(X) als Funktion ihrer extensiven Variablen X = (U, V, N)die Gleichung

$$S(\lambda X) = \lambda S(X), \quad \lambda > 0 \tag{3.2}$$

erfüllt, was durch Differentiation auf die Eulersche Differentialgleichung $\sum_i X_i \frac{\partial S}{\partial X_i} = S(X)$ und die daraus folgende Homogenitätsrelation $S = (U + pV - \mu N)/T$ führt.

Die Annahme Gl. (3.1) ist hier natürlich von einem ganz anderen Kaliber: zunächst sind die Variablen ja t und h, also intensive Größen. Was bedeutet Homogenität hier? Zunächst definieren wir (STANLEY)

Definition Funktionen f(x, y) mit

$$f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda f(x, y), \quad \lambda > 0, \quad a, b, \in \mathbb{R}$$
(3.3)

heißen verallgemeinerte homogene Funktionen.

Die obige Form f(t,h) der freien Energie ist eine solche verallgemeinerte homogene Funktion mit $a = 1/(2 - \alpha \text{ (für } t) \text{ und } b = \Delta/(2 - \alpha) \text{ (für } h).$

3.1.1 Skalengesetze

(GOLDENFELD) Aus der Skalenform Gl. (3.1) ergibt sich nun eine Relation zwischen kritischen Exponenten wie folgt: zunächst wird die Magnetisierung

$$M = -\frac{1}{k_B T} \frac{\partial F}{\partial h} = -\frac{1}{k_B T} t^{2-\alpha-\Delta} g'_F(h/|t|^{\Delta}).$$
(3.4)

Für h = 0 definiert das gerade das Verschwinden des Ordnungsparameters gemäß $M \propto t^{\beta}$, also $\beta = 2 - \alpha - \Delta$.

Weiterhin ist die isotherme Suszeptibilität

$$\chi_T = \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{1}{k_B T} t^{2-\alpha-2\Delta} g_F''(h/|t|^{\Delta}), \qquad (3.5)$$

was für h=0 wi
e $\propto t^{-\gamma}$ mit dem Exponenten $\gamma=-2+\alpha+2\Delta$ gehen muss. Insgesamt also

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$
, Rushbrookes Skalengesetz. (3.6)

Rushbrookes Skalengesetz spezifiziert die Rushbrooke–Ungleichung zu einer Gleichung. $^{\rm 1}$

¹ Die Rushbrooke–Ungleichung kann aus den Stabilitätsbedingungen der Thermodynamik hergeleitet werden (SKRIPT THERMODYNAMIK):

Wir gehen aus von $\chi_T(C_H - C_M) = T \alpha_H^2$, Gl. (1.56) und

$$C_M \equiv \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_M = \left. T \frac{\partial S}{\partial T} \right|_M = -T \frac{\partial^2 F}{T^2} \ge 0, \quad F \text{ konkav in } T, \tag{3.7}$$

wobei wir die Differentiale

$$dU = TdS + HdM = T\frac{\partial S}{\partial T}dT + \frac{\partial S}{\partial M}dM + HdM$$

$$dF = -SdT + HdM$$
(3.8)

benutzt haben. Deshalb gilt die Ungleichung

$$C_H = \frac{T\alpha_H^2}{\chi_T} + C_M \ge \frac{T\alpha_H^2}{\chi_T}.$$
(3.9)

Desweiteren gilt in der Nähe von T_c ,

$$C_H \propto (-t)^{-\alpha'}, \quad \chi_T \propto (-t)^{-\gamma'}, \quad \alpha_H \propto (-t)^{\beta-1}.$$
 (3.10)

Wir benutzen jetzt das folgende

Lemma Sei $f(x) \leq g(x)$ und $f(x) \propto x^{\lambda}$ und $g(x) \propto x^{\phi}$ für $x \to 0^+$. Dann folgt $\lambda > \phi$. Damit folgt in unserem Falle $2(\beta - 1) + \gamma' \geq -\alpha'$ oder Was jetzt noch aussteht, ist der Beweis, dass α in Gl. (3.1) tatsächlich der kritische Exponent für die spezifische Wärme bei h = 0 ist, d.h. $C \propto |t|^{-\alpha}$. Hierzu differenzieren wir F(t, h) zweimal nach t für t > 0 und zeigen (AUFGABE)

$$C = |t|^{-\alpha} g_C(h/|t|^{\Delta}) \tag{3.12}$$

mit einer neuen Skalenfunktion $g_C(x)$ von nur einer Variablen x. Wenn wir hier h = 0 setzen, erhalten wir das gewünschte Skalengesetz.

(KARDAR) Schließlich betrachten wir $m(t \to 0, h) \propto h^{1/\delta}$ (Definition des kritischen Exponenten δ für die Magnetisierung bei T_c als Funktion vom Magnetfeld h). Für $t \to 0$ muss sich die t-Abhängigkeit in Gl. (3.4) herauskürzen. Das geht nur, falls

$$\lim_{t \to 0} m(t,h) \propto t^{2-\alpha-\Delta} (h/|t|^{\Delta})^p \tag{3.13}$$

mit einer Potenz p, so dass sich t herauskürzt. Durch Vergleich finden wir $2 - \alpha - \Delta = \Delta p$ und somit $m(t \to 0, h) \propto h^{(2-\alpha-\Delta)/\Delta}$, also

$$\delta = \frac{\Delta}{2 - \alpha - \Delta} = \frac{\Delta}{\beta} \rightsquigarrow \Delta = \beta \delta \tag{3.14}$$

unter Benutzung von $\beta = 2 - \alpha - \Delta$ (s. nach Gl. (3.4)), was auch auf $\delta - 1 = \frac{\Delta}{\beta} - 1 = \frac{2\Delta + \alpha - 2}{\beta}$ führt und damit wegen $\gamma = -2 + \alpha + 2\Delta$ auf

$$\delta - 1 = \frac{\gamma}{\beta}$$
, Widoms Skalengesetz (3.15)

3.1.2 Korrelationslänge und 'Hyperscaling'

(KARDAR) Aus der freien Energie F folgt zunächst noch nichts für z.B. die räumliche Korrelationsfunktion $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ und deren Zerfall für $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \to \infty$, der durch die Korrelationslänge ξ bestimmt wird. Analog zur Homogenitätsannahme Gl. (3.1) für die freie Energie setzt man deshalb

$$\xi(t,h) = |t|^{-\nu} g_{\xi}(h/|t|^{\Delta})$$
(3.16)

 an^{2}

Man macht jetzt eine zweite Annahme, die Gl. (3.1) ersetzt bzw. aus der Gl. (3.1) automatisch folgt, und zwar einen Ansatz für den singulären Anteil der freien Energie Fin der Nähe von T_c . Die Annahme hierbei ist, dass das singuläre Verhalten von F allein

 $\alpha' + 2\beta + \gamma' \ge 2$, Rushbrooke-Ungleichung , (3.11)

vgl. die Anekdote in STANLEY. Was hier noch nicht gezeigt ist, ist die Gleichheit der Exponenten von beiden Seiten, d.h. $\gamma = \gamma'$ etc.

² Das Δ hier ist nicht unbedingt dasselbe wie in Gl. (3.1).

durch die Divergenz der Korrelationslänge ξ hervorgerufen wird (und nicht z.B. durch andere, von ξ unabhängige Divergenzen). Da die freie Energie als thermodynamisches Potential extensiv sein muss, setzt man

$$F(t,h) = \left(\frac{L}{\xi}\right)^d g_s + \sum_i \left(\frac{L}{a_i}\right)^d g_i, \qquad (3.17)$$

wobei g_s und die g_s nicht-singuläre Funktionen von intensiven Variablen sind (z.B. Temperatur, Dichte, Magnetfeld), und die a_i weitere endliche Längenskalen im System bezeichnen, bis hinunter zu einer mikroskopischen Längenskala wie der Gitterkonstante a. Wir interpretieren den singulären Anteil $\left(\frac{L}{\xi}\right)^d g_s$, indem wir uns das System in unabhängige *Blöcke* der Größe ξ^d aufgeteilt denken (für Längen größer als ξ gibt es ja i. W. keine Abhängigkeit mehr zwischen den mikroskopischen Variablen, zumindest für kurzreichweitige Wechselwirkung). Der singuläre Beitrag zu F ist dann durch die Anzahl L^d/ξ^d der Blöcke gegeben (*Blockspins* im Ising–Fall, vgl. weiter unten), von denen jeder den gleichen Beitrag g_s zu F liefert.

Man beachte, dass Gl. (3.17) natürlich zunächst nichts weiter als ein Ansatz ist, in dem z.B. neben g_s nur ein zusätzliches g_i aufzutreten braucht und nicht viele. Letztlich interessieren wir uns hier sowieso nur für den singulären Anteil, und dieser ergibt für den singulären Anteil f_s der freien Energie pro Volumen (bzw. Gitterplatz)

$$f_s = \xi^{-d} = |t|^{d\nu} g_f(h/|t|^{\Delta}).$$
(3.18)

Um konsistent mit unserem bisherigen Skalengesetz Gl. (3.1) für die freie Energie zu bleiben, haben wir hierbei wieder die -d-te Potentz der Skalenfunktion g_{ξ} , Gl. (3.16), mit der Funktion g_s in Gl. (3.17) zu einer neuen Skalenfunktion $g_f(h/|t|^{\Delta})$ kombiniert.

Der Vergleich von Gl. (3.18) mit $f_s(t,h) = L^{-d} |t|^{2-\alpha} g_F(h/|t|^{\Delta})$ aus Gl. (3.1) liefert sofort eine Beziehung für den Exponenten α ,

$$2 - \alpha = d\nu$$
, Josephsons Skalengesetz. (3.19)

Das Skalengesetz von Josephson beinhaltet die Dimension d des Systems explizit und wird deshalb traditionell als Hyper-Skalengesetz ('hyperscaling') bezeichnet.

GULTIGKEIT von Josephsons Skalengesetz.

Schließlich erhalten wir noch ein weiteres Skalengesetz aus unserer Korrelationsfunktion $G(\mathbf{r})$, deren räumliches Integral ja gerade über das Flukuations-Dissipations-Theorem die isotherme Suszeptilität ergibt, Gl. (2.125), also

$$\chi_T \propto |t|^{-\gamma} \propto \int d^d \mathbf{r} G(\mathbf{r}).$$
 (3.20)

Wir nehmen hier an, dass wir in der Nähe von T_c den Integranden durch sein Verhalten Gl. (2.120), $G(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} am$ kritischen Punkt ersetzen können und χ_T durch Beiträge im Integral wieder von Blöcken der Größe ξ bestimmt ist (analog zu Gl. (3.17));

$$\chi_T \propto |t|^{-\gamma} \propto \int_0^{\xi} \frac{dr r^{d-1}}{r^{d-2+\eta}} \propto \xi^{2-\eta} \propto |t|^{-\nu(2-\eta)},$$
 (3.21)

wodurch wir ein weiteres Hyper-Skalengesetz erhalten, nämlich

$$\gamma = \nu(2 - \eta)$$
, Fischers Skalengesetz. (3.22)

3.2 Reparametrisierungen



Fig. 3.1: (Aus: J. Cardy, 'Scaling and Renormalizationin Statistical Physics'). Ising-Modell bei $T = T_C$, links vor und rechts nach einer Blockspin-Transformation.

Angenommen, ein kompliziertes System wird durch eine Menge von Parametern $\{K\}$ beschrieben. Die Methode hat das Ziel, diese Beschreibung durch den Übergang zu einer anderen Menge

$$\{K'\} = \mathcal{R}\{K\} \tag{3.23}$$

zu vereinfachen, und zwar so, dass mit $\{K'\}$ dieselbe Physik beschrieben wird. Gl. (3.23) sieht ein wenig wie eine Koordinatentransformation aus, wie wir sie aus Symmetrietransformationen kennen. Es geht im Folgenden allerdings mehr als nur um Drehungen, Translationen, Spiegelungen etc. , und die Gleichung Gl. (3.23) wird auch keine Symmetrietransformation darstellen.

3.2.1 Blockspins

Wir lassen uns trotzdem vom Gedanken der Symmetrie leiten ³, wenn wir uns das Ergebnis einer numerischen Simulation des Ising-Modells auf einem Gitter (z.B. Quadratgitter mit Gitterkonstante a) in d = 2 am kritischen Punkt anschauen, Fig. (3.1): schwarze Kästchen sollen z.B. Spin-down bezeichnen, weisse Spin-up. Das Bild scheint die Eigenschaft einer Selbstähnlichkeit zu haben, ähnlich wie bei Fraktalen: Wenn man näher herangeht oder weiter weg, sieht man letztendlich *qualitativ* immer 'das gleiche', d.h. statistisch die gleiche Verteilung von weissen und schwarzen Clustern.

Wir führen deshalb eine *Grobkörnung* des Bildes durch, indem wir **Kadanoff-Block**spins einführen. (ITZYKSON, DROUFFE) Wir fassen dabei λ^d ($\lambda \in \mathbb{N}$) Spins σ_i (mit

³ S. K. Ma, Modern Theory of Critical Phenomena

den Werten ± 1) zu einem Blockspin s_b zusammen, und zwar durch die Vorschrift

$$s_b \equiv \operatorname{sign} \sum_{i \in b} \sigma_i. \tag{3.24}$$

Die Vorschrift muss eigentlich noch durch einen Zusatz für den Fall Null in der Summe ergänzt werden, sowie durch eine genauere Angabe, über welches Gebiet eigentlich genau summiert wird. Der Index *b* läuft jetzt über ein neues Gitter mit Gitterkonstante $\lambda a > a$ und neuen Gitterplätzen \mathbf{r}_b , deren Position hier erst einmal noch nicht genau spezifiziert wird.

Die Blockspins stellen eine Vergröberung der 'Auflösung' dar, denn es gibt jetzt ja keine Feinstruktur innerhalb der Blocks der Größe $(\lambda a)^d$. Unabhängig von den Details in Gl. (3.24), haben wir mit den Blockspins auf dem neuen Gitter jetzt ein Modell vorliegen, in dem sich die Längenskala im folgenden Sinne geändert hat: Wenn z.B. im ursprünglichen Modell zwei Spins λ Gitterplätze auseinander liegen, sind im neuen Modell die zugehörigen Blockspins nur noch einen Gitterplatz voneinander entfernt,

$$\mathbf{x} \to \mathbf{x}_{\lambda} \equiv \mathbf{x}/\lambda \tag{3.25}$$

Wir erwarten, dass eine Grobkörnung des Bildes in der oben erwähnten numerischen Simulation des Ising-Modells das Bild im Allgemeinen auch qualitativ ändert. Abseits vom kritischen Punkt ist das auch der Fall (BILD in der VL), nur genau am kritischen Punkt beobachtet man die erwähnte Selbstähnlichkeit. Da bei Annäherung an den kritischen Punkt die Korrelationslänge ξ divergiert, wird die Ungleichung

$$a\lambda \ll \xi$$
 (3.26)

immer besser erfüllt, je weiter man sich dem kritischen Punkt nähert. Für eine Iteration der Grobkörnung mit Blockspins kann man sich dann sogar vorstellen, dass sich am kritischen Punkt in dem Bild dann qualitativ sogar gar nichts mehr ändert (vorausgesetzt, man startet mit einem praktisch unendlich großem System, so dass Ränder keine Rolle spielen und man immer weiter machen kann).

Im kanonischen Ensemble wird das Isingmodell mit NN-Wechselwirkung durch die Zustandssumme mit zwei dimensionslosen Parametern β (inverse Temperatur mal Kopplungsstärke) und H (Magnetfeld mal inverse Temperatur) in der dimensionslosen Wirkung S beschrieben,

$$Z \equiv \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^S, \quad S \equiv \beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_i \sigma_i.$$
(3.27)

In Blockspins wird thermodynamisch dieselbe Physik beschrieben, falls die Zustandssummen identisch sind,

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^S = \sum_{s_b = \pm 1} e^{S_\lambda}, \quad e^{S_\lambda} = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \left(\prod_b \delta_{s_b, \operatorname{sign} \sum_{i \in b} \sigma_i} \right) e^S$$
(3.28)

Hierbei haben wir das einfache Kollabieren der Summen über die Kronecker-Symbole benutzt,

$$\sum_{s_b=\pm 1} \left(\Pi_b \delta_{s_b, \operatorname{sign} \sum_{i \in b} \sigma_i} \right) = \sum_{s_1 s_2 \dots} \delta_{s_1, \operatorname{sign} \sum_{i \in 1} \sigma_i} \delta_{s_2, \operatorname{sign} \sum_{i \in 2} \sigma_i} \dots = 1.$$
(3.29)

Die neue Wirkung

$$S_{\lambda} = \log \sum_{\sigma_i = \pm 1} \left(\prod_b \delta_{s_b, \operatorname{sign} \sum_{i \in b} \sigma_i} \right) e^S$$
(3.30)

in den Blockspins ist i.a. extrem schwierig auszurechnen, was kein Wunder ist, da ja wieder dieselbe Zustandsumme herauskommen soll.

3.2.2 Approximation der neuen Wirkung

Der entscheidende Schritt vorwärts ist jetzt die kühne Annahme, dass die neue Wirkung S_{λ} wieder dieselbe Form wie die ursprüngliche Wirkung S hat,

$$S_{\lambda} \equiv \beta J_{\lambda} \sum_{(b,b')} s_b s_{b'} + \beta H_{\lambda} \sum_b s_b + \text{irrelevanteTerme}, \qquad (3.31)$$

nur mit neuen, von λ abhängigen Parametern J_{λ} und H_{λ} . Eigentlich würde man viel mehr Terme erwarten (im Prinzip unendlich viele, also eine Theorie mit unendlich vielen Parametern statt zwei Parametern), die z.B. komplizierte Korrelationen zwischen den Blockspins beschreiben, um wieder bei derselben Zustandssumme herauszukommen. Der Trick ist aber, dass wir ja letztlich nicht auf *dieselbe* Zustandssumme, sondern nur auf ein qualitativ äquivalentes Z kommen möchten. Wir müssen spätestens im Nachhinein begründen, warum all die anderen Terme in S_{λ} 'für unsere Zwecke' (d.h. um bestimmte Eigenschaften erfolgreich zu beschreiben) irrelevant sein sollen - ein Vorgehen ganz im Geiste der Thermodynamik.

Die Berechnung von S_{λ} , Gl. (3.30) in der approximierten Form Gl. (3.31) bleibt trotzdem ein schwieriges Unterfangen. Immerhin haben wir jetzt aber ein Ziel: wir wollen aus den alten Parametern $K \equiv K_1 \equiv (J, H)$ neue Parameter $K_{\lambda} \equiv (J_{\lambda}, H_{\lambda})$ bestimmen. Wenn wir für einen Moment $\lambda \geq 1$ als kontinuierlichen Parameter auffassen, sehen wir, was mathematisch vor uns liegt: die Bestimmung einer Kurve K_{λ} im Parameterraum.

Die Form Gl. (3.31) hat nun drastische Konsequenzen für die Thermodynamik, d.h. die Form der freien Energie F(K) pro Gitterplatz. Zunächst gilt wegen Gl. (3.28)

$$NF(K) = -\beta \log Z = -\beta \log \operatorname{Tr}_{\sigma_i = \pm 1} e^S = -\beta \log \operatorname{Tr}_{s_b = \pm 1} e^{S_\lambda}.$$
(3.32)

Auf der rechten Seite der Gleichung wird die Spur über das neue Gitter mit N/λ^d Gitterplätzen und der approximierten Wirkung Gl. (3.31) durchgeführt, die aber funktional genau die gleiche Form wie die alte Wirkung hat (bis auf die irrelevante Terme), nur mit geänderten Parametern J_{λ} und H_{λ} . Dabei muss also funktional wieder die gleiche freie Energie, nun für N/λ^d Gitterplätze und als Funktion von J_{λ} und H_{λ} herauskommen. Es gilt also

$$F(K) = \lambda^{-d} F(K_{\lambda}) + F_{\rm irr}.$$
 (3.33)

Hierbei führen die irrelevanten Terme in Gl. (3.31) zu $F_{\rm irr}$.

3.2.3 Beispiel: Blockspins für das Isingmodell (1)

Wir betrachten das Isingmodell auf einem *Dreiecksgitter* (d = 2), und zwar zunächst den Fall ohne Magnetfeld und definieren Blockspins μ_a , die aus drei Spins auf jeweils einem Dreieck (SKIZZE in VL) bestehen;

$$S = \beta \sum_{(ij;a,b)} \sigma_i^a \sigma_j^b, \quad S_\lambda = \beta_\lambda \sum_{(a,b)} \mu_a \mu_b, \quad \mu_a \equiv \operatorname{sign}(\sigma_1^a + \sigma_2^a + \sigma_3^a)$$
(3.34)

Hier ist die neue Wirkung S_{λ} wieder wie oben approximiert. Im ursprünglichen S läuft die Summe über nächste Nachbarn auf einem Dreiecksgitter, wobei die Aufteilung in Blöcke (Indizes a, b) bereits vorgenommen wurde und i, j = 1, 2, 3 damit die Spins innerhalb der Blöcke nummerieren. Wir haben auch die Kombination βJ zu einer neuen dimensionslosen inversen Temperatur β umdefiniert. Der Skalenfaktor ist jetzt $\lambda^2 = 3$, also $\lambda = \sqrt{3}$, denn aus ursprünglich N Gitterplätzen werden N/3 Blockspin-Gitterplätze.

Die Invarianz der Zustandsumme Z liefert wieder

$$Z = \sum_{\mu_a} e^{S_\lambda}, \quad e^{S_\lambda} = \sum_{\sigma_i^a} \left(\prod_a \delta_{\mu_a, \operatorname{sign}(\sigma_1^a + \sigma_2^a + \sigma_3^a)} \right) e^S.$$
(3.35)

Wir schreiben $S \equiv S_0 + S_1$ und

$$e^{S_{\lambda}} = Z_0 \langle e^{S_1} \rangle, \quad \langle \dots \rangle \quad \equiv \quad Z_0^{-1} \sum_{\sigma_i^a} \left(\Pi_a \delta_{\mu_a, \operatorname{sign}(\sigma_1^a + \sigma_2^a + \sigma_3^a)} \right) e^{S_0} \dots \tag{3.36}$$

$$Z_0 \equiv \sum_{\sigma_i^a} \left(\Pi_a \delta_{\mu_a, \text{sign}(\sigma_1^a + \sigma_2^a + \sigma_3^a)} \right) e^{S_0}, \qquad (3.37)$$

wobei hier alle Größen von einer gegebenen Blockspin-Konfiguration $(\mu_1, \mu_2, ...)$ abhängen. Der Anteil $S_0(\mu_1, \mu_2, ...)$ soll hierbei die Wechselwirkung der Spins nur innerhalb der Blöcke für gegebene $(\mu_1, \mu_2, ...)$ beschreiben, und entsprechend S_1 den restlichen Anteil durch die Wechselwirkung von Spins auf benachbarten Blöcken. Wenn wir z.B. S_1 ganz vernachlässigen, haben wir $e^{S_{\lambda}} = Z_0$. Die 'freie' Zustandssumme Z_0 entspricht N/3unabhängigen Dreiecken, von denen jedes die Zustandssumme $e^{3\beta} + 3e^{-\beta}$ hat (NACH-PRÜFEN durch Aufmalen der Konfigurationen), also

$$Z_0 = \left(e^{3\beta} + 3e^{-\beta}\right)^{N/3}$$
(3.38)

völlig unabhängig von den Werten der $(\mu_1, \mu_2, ...)$. Zu berechnen bleibt also $\langle e^{S_1} \rangle$, für das wir eine Approximation durch eine *Clusterentwicklung* machen, die im hier betrachteten einfachsten Fall mit

$$\langle e^{S_1} \rangle \approx e^{\langle S_1 \rangle}$$
 (3.39)

benutzt wird. ⁴ Der Erwartungswert von S_1 wird nach Gl. (3.36) mit der 'freien' Wirkung (Boltzmann-Gewicht e^{S_0}) berechnet, in der es keine Wechselwirkung zwischen beachbarten Blöcken *a* und *b* gibt. Für ein solches Paar, z.B. σ_1^a und σ_2^b , $a \neq b$ in $\langle S_1 \rangle$, gilt also die Faktorisierung

$$\langle \sigma_1^a \sigma_2^b \rangle = \langle \sigma_1^a \rangle \langle \sigma_2^b \rangle. \tag{3.40}$$

(LE BELLAC) Für Blockspin $\mu_a = +1$ haben wir vier Konfigurationen der $\sigma_1^a, \sigma_2^a, \sigma_3^a$ mit Boltzmann-Gewichten $e^{3\beta}$ (alle Spins nach oben) bzw. $e^{-\beta}$ (ein Spin nach unten), mit Erwartungswert $\langle \sigma_i^a \rangle = (e^{3\beta} + 2e^{-\beta} - e^{-\beta})/Z_0$. Für Blockspin $\mu_a = -1$ haben wir vier Konfigurationen der $\sigma_1^a, \sigma_2^a, \sigma_3^a$ mit Boltzmann-Gewichten $e^{3\beta}$ (alle Spins nach unten) bzw. $e^{-\beta}$ (ein Spin nach oben), mit Erwartungswert $\langle \sigma_i^a \rangle = (-e^{3\beta} - 2e^{-\beta} + e^{-\beta})/Z_0$, jeweils unabhängig von *i*. Insgesamt also

$$\langle \sigma_i^a \rangle = \mu_a \frac{e^{3\beta} + e^{-\beta}}{e^{3\beta} + 3e^{-\beta}},$$
(3.41)

wobei hier im Nenner die Zustandssumme für das Dreieck a steht.

Aus Gl. (3.41) können wir jetzt die neue Wirkung S_{λ} konstruieren, in der die Wechselwirkungsterme $\beta_{\lambda}\mu_{a}\mu_{b}$ jetzt konkret durch die approximierte Wechselwirkung ersetzt wird, d.h.

$$\beta_{\lambda}\mu_{a}\mu_{b} = \beta \langle (\sigma_{1}^{a} + \sigma_{2}^{a})\sigma_{3}^{b} \rangle \rightsquigarrow \beta_{\lambda} = 2\beta \left(\frac{e^{3\beta} + e^{-\beta}}{e^{3\beta} + 3e^{-\beta}}\right)^{2}.$$
(3.42)

Das ist der gesuchte Zusammenhang zwischen β_{λ} und β im Rahmen der benutzten Näherungen.

3.2.4 Renormierte Parameter und Renormierungsgruppe

(KARDAR) Wir formalisieren die obigen konkreten Rechnungen etwas und postulieren ein Verfahren, dass auch in anderen Fällen anwendbar sein soll. Zunächst fassen wir die Hauptschritte zusammen:

- 1. Grobkörnung der 'Auflösung' des Ordnungsparameters (z.B. Magnetisierung): Übergang von Variablen auf einem Gitter mit Gitterkonstante a zu neuen (Block)– Variablen auf einem Gitter mit Gitterkonstante $\lambda a, \lambda > 1$.
- 2. *Re–Skalierung:* Das Bild einer Konfiguration im neuen Gitter ist grobkörniger als vorher. Die ursprüngliche Auflösung, d.h. ein qualitativ äquivalentes Bild erhalten wir im Falle einer Selbstähnlichkeit nur, falls wir es aus größerer Entfernung betrachten. Dazu werden alle Längen \mathbf{x} zu neuen, kleineren Längen $\mathbf{x}_{\lambda} \equiv \mathbf{x}/\lambda$ reskaliert. Die Abmessungen der einzelnen Blöcke werden dadurch wieder so klein wie im ursprünglichen Gitter.

⁴ Hinzu kommen höhere Terme im Exponenten auf der rechten Seite: $\frac{1}{2} (\langle S_1^2 \rangle - \langle S_1 \rangle^2)$, die hier aber vernachlässigt werden.

3. Renormierung: Im neuen Bild ist i. A. der Kontrast gegenüber dem alten Bild geändert. Das kann durch Einführung eines zusätzlichen Faktors ζ in den Blockvariablen, z.B. wie

$$\mu_a = \frac{1}{\zeta} \frac{1}{\lambda^d} \sum_{i \in a} \sigma_i, \tag{3.43}$$

korrigiert werden.

Nach diesen allgemeinen Vorschriften fragen wir nun nach der Änderung der zwei Systemparameter im Isingmodell unter diesem Schema, die wir hier als t (reduzierte Temperatur) und h (reduziertes Magnetfeld) bezeichnen.

Eine Skalentransformation mit dem Dilatationsfaktor λ führt auf eine Abbildung

$$\begin{pmatrix} t \\ h \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} t_{\lambda} \\ h_{\lambda} \end{pmatrix} \equiv S_{\lambda} \begin{pmatrix} t \\ h \end{pmatrix}.$$
(3.44)

Am kritischen Punkt soll die Transformation wegen der Selbstähnlichkeitseigenschaft nichts mehr bewirken, was dann der Fall ist, wenn S_{λ} in der Nähe von t = 0, h = 0 eine lineare Abbildung ist, so dass Null auf Null abgebildet wird. Wir setzen also

$$S_{\lambda} = \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix}$$
(3.45)

an mit analytischen Funktionen $A(\lambda)$, A(1) = 1 etc.

Wegen der Ising–Symmetrie können wir das Magnetfeld umkehren $h \to -h$ bei gleichzeitigem Flippen aller Spins (die Temperaturvariable t bleibt gleich). Die Skalentransformation sollte sich dabei nicht änderen, denn statistisch wird dann die gleiche Situation beschrieben. Das bedeutet aber $C(\lambda) = B(\lambda) = 0$, und die Transformationsmatrix S_{λ} ist diagonal.

Wir können die Transformationen wie die obige zweimal hintereinander ausführen, z.B. mit einen Faktor $\lambda_1 = 2$ und dann mit $\lambda_2 = 3$. Insgesamt ändern wir damit die Längenskala um den Faktor $\lambda_1 \lambda_2 = 6$, und es sollte deshalb ganz allgemein für ein Reparametrisierungs-Schema $\{K_{\lambda}\} = \mathcal{R}_{\lambda}\{K\}$, Gl. (3.23)

$$\mathcal{R}_{\lambda_1 \lambda_2} = \mathcal{R}_{\lambda_1} \mathcal{R}_{\lambda_2} \tag{3.46}$$

gelten. Die Transformationen \mathcal{R}_{λ} haben deshalb eine multiplikative Struktur, es gilt $\mathcal{R}_1 = E$ (Identität). Im obigen konkreten Fall mit den diagonalen 2×2 -Matrizen S_{λ} kann man sogar invertieren, diese Matrizen stellen aber natürlich nur die Transformation der zwei hier relevanten Systemparameter t und h dar, und nicht die des gesamten Systems.

Im Allgemeinen geht durch eine Skalentransformation \mathcal{R}_{λ} mit $\lambda > 1$ Information auf kleinen Längenskalen verloren, z.B. die Details innerhalb der Blockspins. Deshalb ist \mathcal{R}_{λ} im Allgemeinen nicht invertierbar, und man bezeichnet die Menge der \mathcal{R}_{λ} als *Halbgruppe*. Dennoch hat sich die Bezeichnung **Renormierungsgruppe** eingebürgert. Aus der (Halb)-gruppeneigenschaft folgt eine konkrete Form für unsere Koeffizientenfunktionen $A(\lambda)$ und $D(\lambda)$: wir haben die Funktionalgleichung $A(\lambda_1\lambda_2) = A(\lambda_1)A(\lambda_2)$, A(1) = 1, die auf das Potenzgesetz $A(\lambda) = \lambda^{y_t}$ führt, entsprechend $D(\lambda) = \lambda^{y_h}$ mit kritischen Exponenten y_t und y_h . In der Nähe des kritischen Punktes gilt also

$$t_{\lambda} = \lambda^{y_t} t, \quad h_{\lambda} = \lambda^{y_h} h. \tag{3.47}$$

Falls wir die Skalentransformation nicht genau am, sondern abseits des kritischen Punktes durchführen, wird die vormals endliche Korrelationslänge ξ zu $\xi_{\lambda} = \xi/\lambda$, d.h. wegen $\lambda > 1$ noch kleiner als vorher, was wir als 'weniger kritisch' interpretieren. Die Transformation muss uns also vom kritischen Punkt wegbewegen, weshalb die Exponenten y_t und y_h positiv sein müssen.

3.2.5 Skalentransformation als dynamisches System

In einem nächsten Schritt fassen wir in der Skalentransformation Gl. (3.23) für die Blockspins, $\{K'\} = \mathcal{R}\{K\}$, die neuen Parameter $K' \equiv K_{\lambda}$ als kontinuierliche Kurven $K_{\lambda} \equiv \mathbf{k}(\lambda) \in \mathbb{R}^p$ im *p*-dimensionalen Parameterraum auf. Der Skalenparameter $\lambda > 1$ wird jetzt kontinuierlich gemacht und als Kurvenparameter aufgefasst. Statt einer Iteration $\{K'\} = \mathcal{R}\{K\}$ wie bei den Blockspins gehen wir jetzt von einem dynamischen System als Skalentransformation aus, d.h. einer Differentialgleichung

$$\mathbf{k}(\lambda) = \mathcal{F}(\mathbf{k}(\lambda)). \tag{3.48}$$

Welche Bedeutung haben die Fixpunkte \mathbf{k}^* der Skalentransformation? Sie sind definiert über

$$\mathcal{F}(\mathbf{k}^*) = 0. \tag{3.49}$$

Da $\dot{\mathbf{k}}(\lambda) \equiv d\mathbf{k}/d\lambda$ die Änderung der Parameter des Systems bei einer Änderung des Skalenparameters (Änderung der Blockspin-Größe im Ising-Modell) ist, gilt am Fixpunkt also, dass für jedes $d\lambda \neq 0$ das entsprechende $d\mathbf{k}$ verschwindet, d.h. die Systemparameter ändern sich dort nicht mehr.

(GOLDENFELD). Andererseits ändert sich die Längenskala Gl. (3.25) bei einer Skalentransformation, $\mathbf{x} \to \mathbf{x}_{\lambda} \equiv \mathbf{x}/\lambda$. Insbesondere gilt dann für die Korrelationslänge $\xi(\mathbf{k})$ am Fixpunkt $\xi(\mathbf{k}^*) = \xi(\mathbf{k}^*)/\lambda$. Daraus folgt, dass an den Fixpunkten $\xi = \infty$ oder $\xi = 0$ gelten muss. Der Fall $\xi = \infty$ entspricht dem kritischen Punkt beim Phasenübergang. Dieser Fall war der Ausgangspunkt unserer Diskussion der Block-Spins in dem numerisch erstellten Bild des Ising-Spinsystems am kritischen Punkt. Weiterhin wird der Fall $\xi = 0$ als *trivialer Fixpunkt* bezeichnet, er entspricht einem nicht-wechselwirkenden System.

Wir können nun die üblichen Methoden der nichtlinearen dynamischen Systeme (SKRIPT MECHANIK WS 2008/2009) verwenden, insbesondere die Stabilitätsanalyse in der Umgebung der Fixpunkte von Gl. (3.48). Dort schreiben wir

$$\dot{\mathbf{k}}(\lambda) = \mathcal{F}(\mathbf{k}^*) + \mathcal{M}(\mathbf{k}(\lambda) - \mathbf{k}^*) + \dots, \quad \mathcal{M}_{ij} \equiv \left. \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial k_l} \right|_{\mathbf{k}^*}.$$
(3.50)

Wir multiplizieren diese Gleichung von links mit den linken (Zeilen-)Eigenvektoren \mathbf{e}_i der Jacobi-Matrix \mathcal{M} , die über

$$\mathbf{e}_i \mathcal{M} = y_i \mathbf{e}_i \tag{3.51}$$

mit den Eigenwerten y_i definiert sind, $\mathbf{e}_i \dot{\mathbf{k}}(\lambda) = y_i \mathbf{e}_i(\mathbf{k}(\lambda) - \mathbf{k}^*) + \dots$, und mit der Definition von neuen 'Eigenkoordinaten' $u_i(\lambda)$ im Raum der Systemparameter folgen dann in der Nähe eines Fixpunkts die entkoppelten Gleichungen

$$\dot{u}_i(\lambda) = y_i u_i(\lambda), \quad i = 1, \dots, p.$$
(3.52)

Wie bei dynamischen Systemen kann man jetzt mittels der y_i eine Stabilitätsanalyse eines Fixpunktes durchführen: Wir betrachten einen Punkt $\mathbf{u} \equiv \mathbf{u}(\lambda = 1)$ in der Nähe eines Fixpunktes. Für die Entwicklung der Koordinaten von $\mathbf{u}(\lambda)$ gilt dann

$$u_i(\lambda) = u_i + \dot{u}_i d\lambda + O(d\lambda^2) = u_i \left(1 + y_i d\lambda\right) + O(d\lambda^2) = u_i \lambda^{y_i} + O(d\lambda^2)$$
(3.53)

Die Richtungen u_i erhalten je nach dem Vorzeichen der y_i (bei reellen Eigenwerten y_i , was meistens der Fall ist) im Zusammenhang der Skalentransformationen besondere Namen:

$$y_i > 0$$
 , relevant (3.54)

$$y_i < 0$$
 , irrelevant (3.55)

$$y_i = 0$$
 , marginal. (3.56)

Für die relevanten $y_i > 0$ wird u_i vom Fixpunkt weggetrieben, für die irrelevanten $y_i < 0$ wird u_i zum Fixpunkt hingetrieben. Die irrelevanten Richtungen spannen dann einen Unterraum im Parameterraum, der in der Nähe des Fixpunktes die mannigfaltigkeit approximiert, auf der die Trajektorien auf den Fixpunkt zulaufen. Senkrecht zu dieser Mannigfaltigkeit, d.h. in die relevanten Richtungen, laufen sie von ihm weg.

3.2.6 Skalenrelationen

(CARDY) Wir betrachten jetzt konkret das Isingmodell mit p = 2 Systemparametern, βJ und βH , und bezeichnen die Koordinaten in der Nähe des Fixpunkts als u_t bzw. u_h . Die freie Energie erfüllt dann wegen Gl. (3.33), $F(K) = \lambda^{-d} F(K_{\lambda})$ und Gl. (3.53), $u_i(\lambda) = u_i \lambda^{y_i}$, in der Nähe des Fixpunkts die Skalenrelation

$$F(u_t, u_h) = \lambda^{-d} F(u_t \lambda^{y_t}, u_h \lambda^{y_h}), \qquad (3.57)$$

wobei wir weitere mögliche irrelevante Variablen weglassen, ebenso wie den Anteil F_{irr} in der freien Energie. Wir können das nun n mal iterieren, $F(u_t, u_h) = \lambda^{-dn} F(u_t \lambda^{ny_t}, u_h \lambda^{ny_h})$, wobei wir immer noch im linearen Bereich in der Nähe des Fixpunkts bleiben wollen, und deshalb die Iteration bei einem bestimmten n mit z.B. $|u_t \lambda^{ny_t}| = u_{t0}$ stoppen. Auflösen nach n und Einsetzen ergibt

$$F(u_t, u_h) = |u_t/u_{t0}|^{d/y_t} F\left(\pm u_{t0}, u_h |u_t/u_{t0}|^{-y_h/y_t}\right).$$
(3.58)

Um das für das Folgende etwas anschaulicher zu machen, schreiben wir das wieder mit reduzierten physikalischen Temperaturen bzw. Magnetfeldern um,

$$t \equiv \frac{T - T_c}{T_c}, \quad h = \frac{H - H_c}{H_c}.$$
(3.59)

KOMMENTAR βJ . Auf der rechten Seite von Gl. (3.58) ist dann F nur von der Kombination $(h/h_0)|t/t_0|^{-y_h/y_t}$ abhängig, da h_0 und t_0 fest sind. Von den laufenden Variablen t und h haben wir also eine Abhängigkeit der Form

$$F(t,h) = |t/t_0|^{d/y_t} \Phi_{\pm} \left((h/h_0)|t/t_0|^{-y_h/y_t} \right)$$
(3.60)

mit einer Skalenfunktion $\Phi_{\pm}(x)$, die jetzt nur noch von einer Variablen abhängt. Genauer gesagt bekommt man zwei Skalenfunktionen (\pm) , je nachdem ob u_{t0} positiv oder negativ ist.

Durch Vergleich mit unserer ursprünglichen Homogenitätsannahme Gl. (3.1) für die freie Energie, $F(t,h) = |t|^{2-\alpha} g_F(h/|t|^{\Delta})$, erhalten wir sofort

$$d/y_t = 2 - \alpha, \quad y_h/y_t = \Delta. \tag{3.61}$$

Die Skalenform der freien Energie Gl. (3.48) führt also in der Nähe von Fixpunkten direkt auf Gl. (3.60), was starke Konsequenzen für die kritischen Exponenten hat, die wir hier noch einmal als Check direkt ableiten können:

– Exponent α für die spezifische Wärme: definiert über

$$\frac{\partial^2 F}{\partial t^2}\Big|_{h=0} \propto |t|^{-\alpha} \rightsquigarrow \alpha = 2 - d/y_t.$$
(3.62)

Im Prinzip muss man zunächst zwei Exponenten α und α' definieren, je nachdem ob t > 0 oder t < 0. In der obigen Herleitung sehen wir aber, dass beide den gleichen Wert $2 - d/y_t$ haben müssen, da es auf die genaue Form der Skalenfunktionen $\Phi_{\pm}(x)$ gar nicht ankommt.

– Exponent β für die Magnetisierung (Ordnungsparameter): definiert über

$$\left. \frac{\partial F}{\partial h} \right|_{h=0} \propto (-t)^{\beta} \rightsquigarrow \beta = \frac{d-y_h}{y_t}.$$
(3.63)

– Exponent γ für die Suszeptibilität: definiert über

$$\frac{\partial^2 F}{\partial h^2}\Big|_{h=0} \propto |t|^{-\gamma} \rightsquigarrow \gamma = \frac{2y_h - d}{y_t}.$$
(3.64)

Auch alle weiteren kritischen Exponenten sind also nur durch die zwei Eigenwerte y_t und y_d (und die Dimension d des Systems) bestimmt, und es wird nicht mehr zwischen Exponenten für Annäherung von 'oben' bzw. 'unten' unterschieden. Insbesondere erhält man Beziehungen (*Skalenrelationen*)zwischen den Exponenten, wie z.B.

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \qquad (3.65)$$

was die in der phänomenologischen Thermodynamik bewiesene *Rushbrooke-Ungleichung* (SKRIPT THERMODYNAMIK) zu einer Gleichung spezifiziert.

Unsere bisherigen Betrachtungen waren recht allgemein und liefern: 1) Die Skalenform der freien Energie (kann auf Skalenformen für z.B. Korrelationsfunktionen verallgemeinert werden, die lange Zeit nur phänomenologisch als '*Skalenhypothese*' postuliert wurde; 2) die Gleichheit der Exponenten von 'oben und unten'; 3) in der phänomenologischen Thermodynamik bewiesene Ungleichungen zwischen Exponenten (die aus Konvexitätseigenschaften der thermodynamischen Potentiale folgen, SKRIPT THERMODY-NAMIK) werden zu echten Gleichungen.

EXPONENT δ .

AUFGABE: Betrachte die Korrelationslänge $\xi(t)$ für Magnetfeld H = 0 und zeige für den kritischen Exponenten ν in $\xi(t) \propto |t|^{-\nu}$, $t \to 0$ die Beziehung



3.2.7 Beispiel: Blockspins für das Isingmodell (2)

Als Anwendung betrachten wir noch einmal das Isingmodell auf dem Dreiecksgitter ohne Magnetfeld. Aus der Skalenrelation Gl. (3.42) folgt zunächst der Fixpunkt β^* ,

$$\beta_{\lambda} = 2\beta \left(\frac{e^{3\beta} + e^{-\beta}}{e^{3\beta} + 3e^{-\beta}}\right)^2 \rightsquigarrow \beta^* = \frac{1}{4}\ln(1 + 2\sqrt{2}) \approx 0.3356.$$
(3.67)

Andererseits gilt für die inverse Temperatur β und die reduzierte Temperatur t in der Nähe des Fixpunkts $\beta^* \equiv 1/T_c$

$$\beta = \frac{1}{T} = \frac{1}{T_c(t+1)} \rightsquigarrow \beta - \beta^* = \frac{1}{T_c} \left(-t - t^2 - \dots \right) \approx -\frac{t}{T_c}.$$
 (3.68)

und mit $t_{\lambda} = \lambda^{y_t} t$ sowie $y_t = 1/\nu$, Gl. (3.66) folgt in der Nähe von T_c

$$\lambda^{1/\nu} = \frac{t_{\lambda}}{t} = \frac{\beta_{\lambda} - \beta^*}{\beta - \beta^*}.$$
(3.69)

(ITZYKSON, DROUFFE) Explizit liefert das durch Entwickeln von $\beta_{\lambda} - \beta^*$ (AUFGA-BE)

$$(\sqrt{3})^{1/\nu} \approx 1 + 2\beta^* (8 - 5\sqrt{2}) \rightsquigarrow \nu \approx 1.13.$$
 (3.70)

Dieses Ergebnis liegt schon recht nahe an der exakten Lösung $\beta_{\text{ex}}^* = \frac{1}{4} \log 3 \approx 0.27$ und $\nu_{\text{ex}} = 1$, die aus der exakten Onsager-Lösung des Isingmodells folgt (ITZYKSON, DROUFFE). Für ein genaueres Ergebnis muss man weitere Terme in der Clusterentwicklung über Gl. (3.39) hinaus mitnehmen. Weiterhin müsste man dann auch die Rolle von anderen Termen (z.B. übernächste-Nachbar-Wechselwirkung) in der Skalentransformierten Wirkung S_{λ} untersuchen.

3.3 Das Gaußsche Modell

Als zweite Anwendung nach dem Isingmodell auf dem Dreickecksgitter betrachten wir das exakt lösbare Gaußsche Modell, dass wir mit der RG (Renormierungsgruppe) untersuchen wollen.

3.3.1 Exakte Lösung

(KARDAR) Wir nehmen die einfachste Version, die durch eine Zustandssumme

$$Z = \int D[\phi] \exp\left(-L[\phi]\right), \quad L[\phi] \equiv \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{L}{2}(\nabla^2\phi)^2 + \frac{1}{2}t\phi^2 - h\phi\right] \quad (3.71)$$

definiert wird. Im Vergleich zu Gl. (2.92) haben wir jetzt also nur ein Funktional bis zu quadratischen Termen in $\phi(\mathbf{r})$, allerdings haben wir (versuchsweise) einen weiteren Term $\frac{L}{2}(\nabla^2 \phi)^2$ im Funktional mitgenommen, dessen Bedeutung wir diskutieren wollen. Das Modell ist allerdings insofern etwas pathologisch, als dass es z.B. für t < 0 nicht mehr wohldefiniert ist und es deshalb keine geordnete Phase geben kann: Der (noch zu bestimmende) Phasenübergang läuft von t > 0 (ungeordnete Phase) bis zum kritischen Punkt t = 0, aber nicht darüber hinaus.

Zunächst wird das Feld ϕ Fourier-transformiert ⁵,

$$\tilde{\phi}(\mathbf{q}) = \int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}), \quad \phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \tilde{\phi}(\mathbf{q}).$$
(3.72)

Für endliches Volumen V (mit periodischen RB) finden wir die Korrespondenz

$$\int d^d \mathbf{x} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} = (2\pi)^d \delta(\mathbf{q}) \to V \delta_{\mathbf{q},0}$$
(3.73)

mit dem Kronecker-Symbol, um Konsistenz mit der obigen Fouriertrafo für endliche Volumina zu haben. Einsetzen ergibt nun (Nachprüfen als Aufgabe)

$$L[\tilde{\phi}] = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \left[t + q^2 + Lq^4 \right] |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 - h\tilde{\phi}(0).$$
(3.74)

Die Gaußschen Integrationen $\int \prod_{\mathbf{q}} d\tilde{\phi}(\mathbf{q})$ ergeben (Fallunterscheidung $\mathbf{q} = 0, \, \mathbf{q} \neq 0$)

$$Z = e^{Vh^2/2t} \prod_{\mathbf{q}} \left(\frac{2\pi}{t+q^2+Lq^4}\right)^{1/2}$$
(3.75)

mal eine Konstante, die von der genauen Definition des Maßes $\int D[\phi]$ und einem Volumenfaktor wegen des Übergangs von $d\phi(\mathbf{x})$ zu $d\tilde{\phi}(\mathbf{q})$ abhängt.

⁵ Hier einmal nicht mit der üblichen Vorzeichenkonvention im Exponenten, sonders anders herum.

Bis auf eine Konstante ist dann die freie Energie

$$f(t,h) = -\frac{\ln Z}{V} = -\frac{h^2}{2t} + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} \ln(t+q^2 + Lq^4).$$
(3.76)

Jetzt wird im nächsten Schritt das Modell auf ein Gitter mit Gitterkonstante a gesetzt, so dass

$$f_a(t,h) = -\frac{h^2}{2t} + \frac{1}{2} \int_{1.\text{BZ}} \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \ln(t + q^2 + Lq^4), \qquad (3.77)$$

wobei das Integral über die 1. Brillouin-Zone läuft, die durch eine (Hyper)–Kugel mit Radius $\lambda = \pi/a$ modelliert wird, so dass

$$f_a(t,h) = -\frac{h^2}{2t} + \frac{S_d}{2(2\pi)^d} \int_0^\Lambda dq q^{d-1} \ln(t+q^2 + Lq^4)$$
(3.78)

mit dem Faktor S_d aus der Winkelintegration in d Dimensionen.

In Analogie zu unserer Diskussion der spezifischen Wärme in Kap. 2 erhalten wir aus der zweiten Ableitung der freien Energie nach der Temperatur für h = 0 wieder genau die gleichen Ausdrücke wie in Gl. (2.144), mit Integralen der Form

$$I_n(\xi) \equiv \int_0^\Lambda \frac{dqq^{d-1}}{(Lq^4 + q^2 + \xi^{-2})^n}.$$
(3.79)

Für die mögl
che Infrarot
divergenz bei $q \to 0$ sehen wir, dass der Term
 Lq^4 für $t \to 0$ (also $\xi \to \infty$) nun unwes
entlich wird. Das erkennt man auch beim Umskalieren $x \equiv q\xi$, wobei im Nenner des Integranden nach Herausziehen von
 ξ^{-2n}

$$(Lq^{4}\xi^{2} + \xi^{2}q^{2} + 1)^{n} = \left(\frac{L}{\xi^{2}}x^{4} + x^{2} + 1\right)^{n} \to (x^{2} + 1)^{n}$$
(3.80)

wird. Man sagt, dass der Term $Lq^4\xi^2$ bei Annäherung an T_c gegen Null skaliert. Durch Vergleich mit Gl. (2.150) erhalten wir also wieder

$$\begin{aligned} \alpha &= 2 - d/2, \quad d \le 4 \\ &= 0, \quad d \ge 4. \end{aligned} \tag{3.81}$$

Der Vergleich zwischen der Skalenform Gl. (3.1), $F(t,h) = |t|^{2-\alpha}g_F(h/|t|^{\Delta})$ und dem Term $-\frac{h^2}{2t}$ für die *h*-Abhängigkeit der freien Energie, Gl. (3.76), liefert dann in d < 4 für den kritischen Anteil der freien Energie

$$f_{\rm crit}(t,h) = -t^{d/2} \left(a + \frac{h^2}{2t^{d/2+1}} \right)$$
(3.82)

mit dem Exponenten $\Delta = 1/2 + d/4$ und einer Konstanten a, die $f_{\rm crit}(t, h = 0)$ bestimmt.

3.3.2 Lösungs mittels Renormierungsgruppe

(KARDAR) Jetzt betrachten wir das Gaußsche Modell noch einmal, und zwar bezüglich seines kritischen Verhaltens und mit Hilfe des RG–Verfahrens wie in Abschnitt 3.2.4.

Grobkörnung .- Wir wollen Längenskalen zwischen a und $\lambda a > a$ loswerden, also ausintegrieren. Hierzu erinnern wir uns an den Abschneide-Wellenvektor $\Lambda = \pi/a$ für die **q**-Moden. Im Fourier-Raum wollen wir also Fouriermoden $\tilde{\phi}(\mathbf{q})$ mit Wellenvektoren $\Lambda/\lambda < q < \Lambda$ ausintegrieren. Da im Gaußschen Modell alles im **q**-Raum faktorisiert, können wir die Zustandssumme exakt als

$$Z = e^{-V\delta f_{\lambda}(t,h=0)} \int D[\tilde{\phi}(\mathbf{q})] \exp\left(-L_{\lambda}[\tilde{\phi}(\mathbf{q})]\right),$$

$$\delta f_{\lambda}(t,h=0) \equiv \frac{1}{2V} \sum_{\Lambda/\lambda < q < \Lambda} \ln(t+q^2+Lq^4)$$
(3.83)

schreiben, wobei der erste Faktor das bereits integrierte Funktionalintegral über die Wellenvektoren $\Lambda/\lambda < q < \Lambda$ darstellt und sich das restliche Funktionalintegral über die Wellenvektoren $q < \Lambda/\lambda$ ersteckt. Entsprechend sind hierbei in der Wirkung $L_{\lambda}[\tilde{\phi}]$, Gl. (3.74), nur Wellenvektoren $q < \Lambda/\lambda$ vorhanden.

Reskalierung und Renormierung.– Eine Reskalierung $\mathbf{x}_{\lambda} \equiv \mathbf{x}/\lambda$, $V_{\lambda} = V/\lambda^d$ im Ortsraum ist äquivalent zu $\mathbf{q}' \equiv \mathbf{q}_{\lambda} \equiv \mathbf{q}\lambda$ im \mathbf{q} –Raum. Gleichzeitig sollten die Felder ψ im Ortsraum mit einem Kontrast–Faktor $1/\zeta$ renormiert werden, bzw. die Felder $\tilde{\phi}$ im Fourierraum mit einem Faktor 1/z (der noch bestimmt werden muss). Hierzu schreiben wir

$$L_{\lambda}[\tilde{\phi}(\mathbf{q})] = \frac{1}{2V} \sum_{|\mathbf{q}| < \Lambda/\lambda} \left[t + q^2 + Lq^4 \right] |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 - h\tilde{\phi}(0)$$

$$= \frac{\lambda^{-d}}{2V_{\lambda}} \sum_{\mathbf{q}' < \Lambda} \left[t + \lambda^{-2}(q')^2 + \lambda^{-4}L(q')^4 \right] z^2 |\tilde{\phi}'(\mathbf{q}')|^2 - hz\tilde{\phi}'(0)$$

$$= L[\tilde{\phi}'(\mathbf{q}')]$$
(3.84)

mit $\tilde{\phi}'(\mathbf{q}') = \tilde{\phi}(\mathbf{q}\lambda)$ als neuen Integrationsvariablen.

Damit die Form der neuen Wirkung $L[\tilde{\psi}(\mathbf{q}')]$ wirklich dieselbe wie im ursprünglichen Modell Gl. (3.74) bleibt (mit neuen Parametern t', h', L'), müssen diese Parameter

$$t' = z^2 \lambda^{-d} t, \quad h' = zh, \quad L' = z^2 \lambda^{-d-4} L, \quad z^2 \lambda^{-d-2} = 1$$
 (3.85)

erfüllen. Aus der letzten Gleichung für den quadratischen Term erhalten wir $z=\lambda^{1+d/2}$ sowie

$$t' = \lambda^2 t, \quad h' = \lambda^{1+d/2} h, \quad L' = \lambda^{-2} L.$$
 (3.86)

Aus unseren Gleichungen $t_{\lambda} = \lambda^{y_t} t$, $h_{\lambda} = \lambda^{y_h} h$, Gl. (3.47), für die kritischen Exponenten y_t und y_h lesen wir also sofort

$$y_t = 2, \quad y_h = 1 + d/2 \tag{3.87}$$

ab, woraus wieder sofort alle anderen Exponenten folgen, die mit denen aus der exakten Lösung übereinstimmen: Es ist nämlich $\nu = 1/y_t = 1/2$, $\alpha = 2-d\nu = 2-d/2$ (Josephsons Skalengesetz), sowie mit Hilfe von Gl. (3.61)

$$y_h/y_t = \Delta = 1/2 + d/4,$$
 (3.88)

wieder in Übereinstimmung mit der exakten Lösung, vgl. nach Gl. (3.82).

Weiterhin beobachten wir, dass wegen $L' = \lambda^{-2}L$ der zur höheren (zweiten) Ableitung proportionale Term in der ursprünglichen Wirkung gegen Null skaliert. Anders ausgedrückt, ist der zu L proportionale 'Operator' im Gaußschen Modell für das kritische Verhalten *irrelevant*.

Am Fixpunkt der RG–Transformation sind die neuen Parameter t' = h' = L' = 0. Die Wirkung hat dort die Form

$$L_{\rm fix} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} q^2 |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 = \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} (\nabla \phi)^2.$$
(3.89)

3.4 Störungstheorie

Hier folgen wir im Wesentlichen KARDAR. Wir verallgemeinern zunächst die Ising \mathbb{Z}_2 -Symmetrie, indem wir als Ordnungsparameter jetzt ein *n*-komponentiges Vektorfeld

$$m(\mathbf{x}) = (m_1(\mathbf{x}), ..., m_n(\mathbf{x}))^T$$
 (3.90)

im Landau-Funktional zulassen, das wir hier gleich als

$$L[m] \equiv \int d^d \mathbf{x} \left[\frac{t}{2} m(\mathbf{x})^2 + \frac{K}{2} (\nabla m(\mathbf{x}))^2 + um(\mathbf{x})^4 \right]$$
(3.91)

schreiben. Hierbei ist $m(\mathbf{x})^2 \equiv \sum_{i=1}^n m_i(\mathbf{x})^2$, $m(\mathbf{x})^4 = (m(\mathbf{x})^2)^2$ und $(\nabla m(\mathbf{x}))^2 \equiv \sum_{i=1}^n (\nabla m_i(\mathbf{x}))^2$. Beispielsweise können wir uns für n = 2 einen zweikomponentigen Magnetisierungsvektor ('Spin') vorstellen.⁶

Der zu u proportionale Wechselwirkungsterm definiert die Abweichung vom oben diskutierten Gaußschen Modell; im Fourierraum hat er die komplizierte Form

$$U \equiv u \int d^{d}\mathbf{x}m(\mathbf{x})^{4}$$

$$= u \int \frac{d^{d}\mathbf{q}_{1}d^{d}\mathbf{q}_{2}d^{d}\mathbf{q}_{3}}{(2\pi)^{3d}} \sum_{\alpha\beta} m_{\alpha}(\mathbf{q}_{1})m_{\alpha}(\mathbf{q}_{2})m_{\beta}(\mathbf{q}_{3})m_{\beta}(-\mathbf{q}_{1}-\mathbf{q}_{2}-\mathbf{q}_{4}),$$
(3.92)

und wir sehen, dass die einzelnen **q**–Komponenten nicht mehr entkoppeln, sondern alle miteinander wechselwirken. Deshalb läßt sich im Gegensatz zum Gaußschen Modell keine exakte Lösung mehr finden.

⁶ Der Parameter t kann wieder als eine Temperaturvariable $t = (T - T_c)/T_c$ interpretiert werden, allerdings ist das T_c hier nicht die tatsächliche kritische Temperatur des Modells, sondern der Wert der kritischen Temperatur der zugehörigen Landau (Mean-Field)–Theorie. Fixpunkte der RG-Gleichungen mit $t = t^* \neq 0$ machen also durchaus Sinn und sind auch gewissermaßen der 'Normalfall'.

Von der einfachen Störungstheorie in u hatten wir bereits in Abschnitt 2.4.2 Abstand genommen, da sie zum Scheitern verurteilt ist. K. G. Wilson's Einsicht war, dass man diese Störungstheorie mit einem Renormierungsverfahren verbinden muss, und zwar analog zum Vorgehen oben beim Gaußschen Modell. Hierzu teilt man die Fourier-Moden $m(\mathbf{q})$ in zwei Klassen ein, und zwar mit Stufenfunktionen gemäß der Ausintegrations-Vorschrift vom Gaußschen Modell,

$$m(\mathbf{q}) = \tilde{m}(\mathbf{q})\theta(0 < q < \Lambda/\lambda) + \sigma(\mathbf{q})\theta(\Lambda/\lambda < q < \Lambda).$$
(3.93)

Wir schreiben die Zustandssumme als

$$Z = \int D\tilde{m}(\mathbf{q}) D\sigma(\mathbf{q}) e^{-\frac{1}{2} \int_{0}^{\Lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} (t+Kq^{2})(|\tilde{m}(\mathbf{q})|^{2}+|\sigma(\mathbf{q})|^{2})-U[\tilde{m}(\mathbf{q}),\sigma(\mathbf{q})]}$$

$$= \int D\tilde{m}(\mathbf{q}) e^{-\frac{1}{2} \int_{0}^{\Lambda/\lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} (t+Kq^{2})|\tilde{m}(\mathbf{q})|^{2}} \int D\sigma(\mathbf{q}) e^{-\frac{1}{2} \int_{\Lambda/\lambda}^{\Lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} (t+Kq^{2})|\sigma(\mathbf{q})|^{2}-U[\tilde{m}(\mathbf{q}),\sigma(\mathbf{q})]}$$

$$\equiv \int D\tilde{m}(\mathbf{q}) e^{-\frac{1}{2} \int_{0}^{\Lambda/\lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} (t+Kq^{2})|\tilde{m}(\mathbf{q})|^{2}} Z_{\sigma} \left\langle e^{-U[\tilde{m}(\mathbf{q}),\sigma(\mathbf{q})]} \right\rangle_{\sigma}.$$
(3.94)

Die Definition des Erwartungswertes ist hier also für beliebige Funktionen X

$$\langle X \rangle_{\sigma} \equiv \frac{1}{Z_{\sigma}} \int D\sigma(\mathbf{q}) e^{-\frac{1}{2} \int_{\Lambda/\lambda}^{\Lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} (t + Kq^{2})|\sigma(\mathbf{q})|^{2}} X$$
(3.95)

mit der Gaußschen Zustandssumme der σ -Moden (Nachrechnen als AUFGABE, das Neue im Vergleich zur obigen Rechnung im Gaußschen Modell ist der Faktor n)

$$Z_{\sigma} \equiv e^{-V\delta f_{\lambda}^{0}}, \quad \delta f_{\lambda}^{0} = \frac{n}{2} \int_{\Lambda/\lambda}^{\Lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} \ln(t + Kq^{2}). \tag{3.96}$$

Jetzt haben wir alles beisammen, um die Zustandssumme in die Standardform für die folgende Störungstheorie zu bringen;

$$Z = \int D\tilde{m}(\mathbf{q})e^{-\tilde{L}[\tilde{m}(\mathbf{q})]}$$
(3.97)
$$\tilde{L}[\tilde{m}(\mathbf{q})] \equiv V\delta f^{0}_{\lambda} + \frac{1}{2}\int_{0}^{\Lambda/\lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}}(t + Kq^{2})|\tilde{m}(\mathbf{q})|^{2} - \ln\left\langle e^{-U[\tilde{m}(\mathbf{q}),\sigma(\mathbf{q})]}\right\rangle_{\sigma}.$$

Wir wollen jetzt nämlich gar nicht mehr das $\int D\tilde{m}(\mathbf{q})$ -Funktionalintegral bis zum bitteren Ende ausrechnen, sondern nur den 'Hamiltonian', d.h. das Landau-Funktional berechnen, um daraus störungstheoretisch den Fluss der Parameter des Modells unter der RG zu erhalten (und damit die kritischen Exponenten, zumindest störungstheoretisch).

In niedrigster Ordnung ('one–loop') in u haben wir hierfür

$$\ln \left\langle e^{-U[\tilde{m}(\mathbf{q}),\sigma(\mathbf{q})]} \right\rangle_{\sigma} = -\left\langle U[\tilde{m}(\mathbf{q}),\sigma(\mathbf{q})] \right\rangle_{\sigma} + O(u^{2})$$

$$= -u \int \frac{d^{d}\mathbf{q}_{1}d^{d}\mathbf{q}_{2}d^{d}\mathbf{q}_{3}d^{d}\mathbf{q}_{4}}{(2\pi)^{4d}} (2\pi)^{d}\delta^{d}(\mathbf{q}_{1} + \mathbf{q}_{2} + \mathbf{q}_{3} + \mathbf{q}_{4}) \times \\ \left\langle [\tilde{m}(\mathbf{q}_{1}) + \sigma(\mathbf{q}_{1})] \cdot [\tilde{m}(\mathbf{q}_{2}) + \sigma(\mathbf{q}_{2})] [\tilde{m}(\mathbf{q}_{3}) + \sigma(\mathbf{q}_{3})] \cdot [\tilde{m}(\mathbf{q}_{4}) + \sigma(\mathbf{q}_{4})] \right\rangle_{\sigma} + O(u^{2})$$

$$(3.98)$$

zu berechnen.
3.4.1 Das Wicksche Theorem. Diagramme.

Erwartungswerte wie $\langle X \rangle_{\sigma}$ werden mit einer Gaußschen Gewichtsfunktion ausgerechnet (andernfalls wäre die Berechnung gar nicht möglich). Ein Beispiel ist ein Ausdruck wie 7

$$\langle \sigma_{\alpha}(\mathbf{q}_{1})\sigma_{\beta}(\mathbf{q}_{2}) \rangle_{\sigma} \equiv \frac{1}{Z_{\sigma}} \int D\sigma(\mathbf{q}) e^{-\frac{1}{2} \int_{\Lambda/\lambda}^{\Lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} (t+Kq^{2})|\sigma(\mathbf{q})|^{2}} \sigma_{\alpha}(\mathbf{q}_{1})\sigma_{\beta}(\mathbf{q}_{2})$$

$$= \frac{1}{Z_{\sigma}} \int D\sigma(\mathbf{q}) e^{-\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{q}} (t+Kq^{2}) \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}(\mathbf{q})\sigma_{\alpha}(-\mathbf{q})} \sigma_{\alpha}(\mathbf{q}_{1})\sigma_{\beta}(\mathbf{q}_{2})$$

$$= \frac{\delta_{\alpha,\beta} \delta_{\mathbf{q}_{1},-\mathbf{q}_{2}} V}{t+Kq^{2}} \equiv g_{\alpha\beta}(\mathbf{q}_{1},\mathbf{q}_{2}).$$

$$(3.99)$$

Das ist eine Anwendung unsere Gaußintegrale aus dem Anhang ⁸ Für zusammengesetzte Erwartungswerte gilt jetzt eine Zerlegung nach dem *Wickschem Theorem* mittels Kontraktionen (s. Anhang), z. B.

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle_{\sigma} = g_{12} g_{34} + g_{13} g_{24} + g_{14} g_{23}, \qquad (3.100)$$

wobei wie abkürzend $1 = (\alpha_1, \mathbf{q}_1)$ etc. geschrieben haben, entsprechend $g_{12} \equiv g_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ usw.

In den höheren Ordnungen der Störungstheorie in u treten viel mehr Terme auf. Die Rechnungen werden durch ein 'buchhalterisches Mittel', nämlich *Diagramme*, übersichtlicher gemacht. Berechnet werden soll ein Term der Form $\langle m_1...m_l \rangle$, wobei wir wieder abkürzend $1 = (\alpha_1, \mathbf{q}_1)$ etc. schreiben und der Erwartungswert sich jetzt auf eine Wirkung $L[m] = L_0[m] + U[m]$ bezieht mit quadratischer Wirkung L_0 und quartischer Wechselwirkung U wie oben. Hier formulieren wir zunächst alles mit den Feldern m, die Zerlegung nach großen und kleinen Impulsen nach Gl. (3.93) erfolgt dann noch zusätzlich.

- Es werden l externe Punkte hingezeichnet, die den $j = (\alpha_j, \mathbf{q}_j)$ in $\langle m_1 ... m_l \rangle$ entsprechen.
- Für die *p*-te Ordnung in *U* werden *p* vierbeinige *Wechselwirkung-Vertizes* mit *inneren Indizes* (\mathbf{k}_1, i) etc. hingezeichnet (s. Figur).
- Das Wicksche Theorem wird jetzt graphisch dadurch dargestellt, indem alle inneren und äußeren Punkte paarweise verbunden werden, und zwar auf alle topologisch unterschiedliche Arten.
- Dadurch entstehen viele Graphen (Diagramme). Jedes Diagramm wird einzeln ausgerechnet: eine Verbindungslinie zwischen zwei Punkten 1,2 entspricht der Kontraktion zweier ms, d.h. gerade der korrelationsfunktion g_{12} . Ein Vertext entspricht dem Grundausdruck in der Fourierdarstellung von U, d.h. dem Term $u(2\pi)^d \delta^d(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4)$, der Impulserhaltung zum Ausdruck bringt.

 $^{^7}$ Die Summe läuft hier nur über den eingeschränkten Bereich $\Lambda/\lambda < q < \Lambda.$

⁸ Streng genommen müssen wir dieses noch einmal für komplexe Variablen beweisen, da ja $\sigma(-\mathbf{q}) = \sigma^*(\mathbf{q})$. CHECK

- Jetzt wird über die 4p internen Impulse \mathbf{k}_i integriert und zusätzlich über die 2p Indizes *i*, die die inneren Komponenten der Felder *m* beschreiben, summiert (in der Quantenfeldtheorie entsprechen diesen Indizes die Spin-Indizes).
- Jedes Diagramm wird mit dem Faktor $\frac{(-1)^p}{p!}n_p$ gewichtet, wobei n_p die Anzahl der zur selben Topologie gehörigen unterschiedlichen Kontraktionen ist. Der Term $\frac{(-1)^p}{p!}$ kommt hier einfach aus der Entwicklung von e^{-U} (Exponentialfunktion der Wirkung im Funktionalintegral).

In der Entwicklung von Korrelationsfunktionen wie $\langle m_1 m_2 \rangle$ gehen weiterhin nur zusammenhängende Diagramme ein (was bewiesen werden muss), was die Rechnung weiter vereinfacht. Es ist zweckmässig, sich das alles durch die direkte Berechnung bis O(u)klar zu machen. Es gibt in dieser Ordnung zwei Typen von zusammenhängenden Diagrammen, die sich in der Anbindung der inneren Indizes unterscheiden (Diagramme in der VL).

3.4.2 RG-Fluss in niedrigster Ordnung

Das Wicksche Theorem muss jetzt auf Gl. (3.98) angewendet werden. Das Ergebnis ist ein Ausdruck für die grobgekörnte Wirkung

$$\tilde{L}[\tilde{m}(\mathbf{q})] \equiv V\delta f_{\lambda}^{0} + uV\delta f_{\lambda}^{1} + \frac{1}{2} \int_{0}^{\Lambda/\lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} (\tilde{t} + Kq^{2}) |\tilde{m}(\mathbf{q})|^{2}
+ u \int_{0}^{\Lambda/\lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}_{1} d^{d}\mathbf{q}_{2} d^{d}\mathbf{q}_{3}}{(2\pi)^{3d}} \sum_{\alpha\beta} \tilde{m}_{\alpha}(\mathbf{q}_{1}) \tilde{m}_{\alpha}(\mathbf{q}_{2}) \tilde{m}_{\beta}(\mathbf{q}_{3}) \tilde{m}_{\beta}(-\mathbf{q}_{1} - \mathbf{q}_{2} - \mathbf{q}_{4})
\tilde{t} \equiv t + 4u(n+2) \int_{\Lambda/\lambda}^{\Lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}}{(2\pi)^{d}} \frac{1}{t + Kq^{2}} + O(u^{2}).$$
(3.101)

Dieser Ausdruck hat eine Form, die unserem Ausgangspunkt Gl. (3.97) sehr ähnlich ist. Neu ist hier die Ersetzung von t durch \tilde{t} sowie der Zusatzterm $uV\delta f_{\lambda}^{1}$, der aus den Beiträgen in Gl. (3.98) stammt, die keine $\tilde{m}(\mathbf{q})$ -Abhängigkeit haben. Die Parameter Kund u sind (in erster Ordnung in u) unverändert.

Jetzt folgen wir wieder der Logik des RG–Verfahrens wie in Abschnitt 3.2.4 bzw. im gaußschen Modell oben:

Grobkörnung .- Bereits geschehen durch die obige Rechnung.

Reskalierung und Renormierung.– Eine Reskalierung $\mathbf{x}_{\lambda} \equiv \mathbf{x}/\lambda$, $V_{\lambda} = V/\lambda^d$ im Ortsraum ist äquivalent zu $\mathbf{q}' \equiv \mathbf{q}_{\lambda} \equiv \mathbf{q}\lambda$ im \mathbf{q} –Raum.Gleichzeitig führen wir wieder einen Kontrastfaktor für den Ordnungsparameter ein, $\tilde{m}' = \frac{1}{z}\tilde{m}$. Alles wird jetzt umgeschrieben mit gestrichenen Größen \mathbf{q}' und \tilde{m}' , also

$$\tilde{L}'[\tilde{m}'(\mathbf{q}')] \equiv V\delta f_{\lambda}^{0} + uV\delta f_{\lambda}^{1} + \frac{1}{2} \int_{0}^{\Lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}'}{(2\pi)^{d}} \lambda^{-d} z^{2} (\tilde{t} + \lambda^{-2}K(q')^{2}) |\tilde{m}'(\mathbf{q}')|^{2} \qquad (3.102) \\
+ uz^{4} b^{-3d} \int_{0}^{\Lambda} \frac{d^{d}\mathbf{q}_{1}' d^{d}\mathbf{q}_{2}' d^{d}\mathbf{q}_{3}'}{(2\pi)^{3d}} \sum_{\alpha\beta} \tilde{m}_{\alpha}'(\mathbf{q}_{1}') \tilde{m}_{\alpha}'(\mathbf{q}_{2}') \tilde{m}_{\beta}'(\mathbf{q}_{3}') \tilde{m}_{\beta}'(-\mathbf{q}_{1}' - \mathbf{q}_{2}' - \mathbf{q}_{4}').$$

Die renormierte Wirkung hat also dieselbe Form wie die alte, unsprüngliche Wirkung (in der die Integrale bis Λ laufen), wenn Parameter t', K' und u' folgendermaßen definiert werden:

$$t' = \lambda^{-d} z^2 \tilde{t}, \quad K' = \lambda^{-d-2} z^2 K, \quad u' = \lambda^{-3d} z^4 u.$$
 (3.103)

Wir wollen gleich wieder wie beim Gaußschen Modell K' = K als Nebenbedingung setzen, woraus $z = \lambda^{1+d/2}$ folgt, sowie die Rekursion

$$t_{\lambda} = \lambda^{2} \left[t + 4u(n+2) \int_{\Lambda/\lambda}^{\Lambda} \frac{dqq^{d-1}S_{d}}{(2\pi)^{d}} \frac{1}{t + Kq^{2}} \right]$$
$$u_{\lambda} = \lambda^{d-4}u.$$
(3.104)

Jetzt sind wir an einem Punkt angelangt, wo wir die RG-Gleichungen (Flussgleichungen) für den Fluss von t und u im Parameterraum aufstellen können, natürlich hier nur perturbative in erster Ordnung RG-Störungstheorie. Konventionell setzt man

$$\lambda = e^l \tag{3.105}$$

und entwickelt nach kleinen δl um l = 0. Alternative berechnen wir die Ableitung der r.S. nach λ bei $\lambda = 1$: sie erzeugt hier den Fluss,

$$\frac{d}{d\lambda}t_{\lambda}\Big|_{0} = 2t + (-1)(-1)4u(n+2)\Lambda\frac{\Lambda^{d-1}S_{d}}{(2\pi)^{d}}\frac{1}{t+K\Lambda^{2}}$$
(3.106)

$$\left. \frac{d}{d\lambda} u_{\lambda} \right|_{0} = (d-4)u, \tag{3.107}$$

so dass wir

$$\frac{d}{dl}t(l) = 2t + \frac{\Lambda^d S_d}{(2\pi)^d} \frac{4u(l)(n+2)}{t(l) + K\Lambda^2}$$
(3.108)

$$\frac{d}{dl}u(l) = (d-4)u(l)$$
(3.109)

schreiben können.

Die Stabilitätsanalyse um den Fixpunkt $t^* = u^* = 0$ ($Gau\betascher Fixpunkt$ wegen $u^* = 0$) ergibt nun die Exponenten $y_t = 2$ und $y_u = 4 - d$. In d > 4 Dimensionen ist also $y_u < 0$ und die Wechselwirkung U für das kritische Verhalten *irrelevant*, denn die Wechselwirkung skaliert dann gegen Null, während $y_t > 0$ als einziger relevanter Exponent übrigbleibt und korrekt den mean-field-Phasenübergang mit $\nu = 1/y_t = 1/2$ beschreibt. Für d < 4 werden beide Exponenten relevant und der Gaußsche Fixpunkt ist instabil, und wir können an dieser Stelle, d.h. in erster Ordnung Störungstheorie, nichts weiter sagen, da es keine weiteren Fixpunkte gibt.



Fig. 3.2: (Aus: M. Kardar, 'Statistical Physics of Fields'. Flussdiagramm in erster Ordnung in *u*.

3.4.3 RG-Fluss in zweiter Ordnung

In zweiter Ordnung in u passiert schon wesentlich mehr, das Hauptergebnis ist hier das Auftreten eines neuen Fixpunktes (*Wilson–Fisher–Fixpunkt*) in den entsprechenden RG–Gleichungen

$$\frac{d}{dl}t(l) = 2t + \frac{\Lambda^d S_d}{(2\pi)^d} \frac{4u(l)(n+2)}{t(l) + K\Lambda^2} - Au(l)^2$$
(3.110)

$$\frac{d}{dl}u(l) = (d-4)u(l) - Bu(l)^2$$
(3.111)

mit den aus der diagrammatischen Rechnung folgenden Parametern A und B. Neben dem Gaußschen Fixpunkt $t^* = 0, u^* = 0$ entsteht ein neuer Fixpunkt $u^* = (4 - d)/B$, der jetzt interessanterweise proportional zu

$$\varepsilon \equiv 4 - d, \tag{3.112}$$

ist, d.h. der Abweichung von der Dimension 4, weshalb diese Störungstheorie auch als ε -Entwicklung bezeichnet wird. Die zu diesem neuen Fixpunkt gehörigen Exponenten sind

$$y_t = 2 - \frac{n+2}{n+8}\varepsilon + O(\varepsilon^2), \quad y_u = -\varepsilon + O(\varepsilon^2).$$
 (3.113)

Insbesondere wird y_u in d < 4 negativ, also irrelevant, während y_t positiv bleibt. Damit haben wir zum ersten Mal eine Situation erreicht, wo wir den Phasenübergang in d < 4 wirklich erfassen können: Der Gaußschen Fixpunkt bleibt in d < 4 instabil in y_u -Richtung, und der RG-Fluß läuft auf den neuen (Wilson-Fisher)-Fixpunkt, in dessen Nähe der einzig relevante Kontrollparameter die Temperatur (über y_t) bleibt.

4. KONTINUIERLICHE SYMMETRIEN

4.1 Einführung

Ein klassischer Spin **S** sei definiert durch seine *n* Komponenten S_{α} in **S** = $(S_1, ..., S_n)$ mit der Normierung

$$\mathbf{S}^2 = \sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^2 = 1.$$
(4.1)

Wie bei Ising-Modell (n = 1) definiert man eine 'Magnetisierung' als Erwartungswert $\mathbf{m} = \langle \mathbf{S} \rangle$ im thermischen Gleichgewicht. Wieder erwarten wir, dass \mathbf{m} die Rolle eines Ordnungsparameters für Phasenübergänge haben wird. Die Dimension dieses Ordnungsparameters ist n.

Gittermodelle mit n-komponentigen Spins

$$H = -J\sum_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \tag{4.2}$$

bezeichnet man für n > 1 auch als O(n)-Modelle, da das Skalarprodukt $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = (D\mathbf{S}_i)(D\mathbf{S}_j)$ im Raum der Spins invariant unter orthogonalen Rotationen mit Drehmatrix $D \in O(n)$ der Spins ist. Im Ising-Fall n = 1 hat man $S = \pm 1$ und dementsprechend nur eine diskrete \mathbb{Z}_2 -Symmetrie.

Für n > 1 haben wir also eine kontinuierliche Symmetrie vorliegen, und wir erwarten schon allein deshalb qualitativ neue Physik im Vergleich zum Ising-Fall n = 1.

4.2 Goldstone-Moden

Wie im Abschnitt 3.4 bereits geschehen, verallgemeinern wir die Ising \mathbb{Z}_2 -Symmetrie also, indem wir als Ordnungsparameter jetzt ein *n*-komponentiges Vektorfeld

$$\mathbf{S}(\mathbf{x}) = (S_1(\mathbf{x}), \dots, S_n(\mathbf{x}))^T$$
(4.3)

im Landau-Funktional zulassen, das wir hier gleich als

$$L[\mathbf{S}] \equiv \int d^d \mathbf{x} \left[\frac{t}{2} \mathbf{S}(\mathbf{x})^2 + \frac{K}{2} (\nabla \mathbf{S}(\mathbf{x}))^2 + \frac{u}{4} \mathbf{S}(\mathbf{x})^4 - \mathbf{h} \mathbf{S} \right]$$
(4.4)

schreiben. ¹ Beispielsweise können wir uns für n = 2 einen zweikomponentigen Magnetisierungsvektor ('Spin') vorstellen.

¹ Hierbei ist wieder
$$\mathbf{S}(\mathbf{x})^2 \equiv \sum_{i=1}^n S_i(\mathbf{x})^2$$
, $\mathbf{S}(\mathbf{x})^4 = (\mathbf{S}(\mathbf{x})^2)^2$ und $(\nabla \mathbf{S}(\mathbf{x}))^2 \equiv \sum_{i=1}^n (\nabla S_i(\mathbf{x}))^2$

Im Folgenden wollen wir die Konsequenzen der kontinuierlichen Symmetrie für den Fall n > 1 untersuchen. Für räumlich konstantes $\mathbf{S}(\mathbf{x})$ und ohne Magnetfeld ($\mathbf{h} = 0$) hat das Landau-Funktional die Form

$$V(\mathbf{S}) = \frac{t}{2}\mathbf{S}^2 + \frac{u}{4}\mathbf{S}^4,\tag{4.5}$$

was für t < 0 die Form eines 'mexikanischen Huts' besitzt ('mexican hat potential'). Es gibt also für t < 0 nicht wie im Ising-Fall zwei Minima, sondern unendlich viele (durch die Gleichung $\mathbf{S}^2 = -t/u$ bestimmt).

(GOLDENFELD) Für n > 1 ist die Suszeptibilität des Systems eine Matrix (Tensor zweiter Stufe);

$$\chi_{\alpha\beta} \equiv -\frac{\partial^2 f}{\partial h_{\alpha} \partial h_{\beta}} = n_{\alpha} n_{\beta} \chi_{\parallel}(h) + \chi_{\perp}(h) (\delta_{\alpha\beta} - n_{\alpha} n_{\beta}), \qquad (4.6)$$

wobei wir hier gleich eine Zerlegung des Tensors in Anteile parallel und senkrecht zur Richtung des Magnetfeldes $\mathbf{h} \equiv \mathbf{n}h$ gemacht haben (NACHRECHNEN als AUFGABE) und die freie Energie f(h) als unabhängig von der Richtung \mathbf{n} angenommen ist. Hierbei sind die Komponenten

$$\chi_{\parallel}(h) = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}, \quad \chi_{\perp}(h) = -\frac{1}{h} \frac{\partial f}{\partial h} = -\frac{m}{h}$$
(4.7)

mit $m = |\mathbf{m}|$ und der Magnetisierung $\mathbf{m} \equiv \langle \mathbf{S} \rangle$.

Für t < 0 gibt es wieder eine spontan Symmetrie-gebrochenen ('langreichweitig geordnete') Phase, d.h. eine endliche räumlich homogene Magnetisierung $\mathbf{m} \neq 0$ bei $\mathbf{h} = 0$. Aus Gl. (4.7) folgt sofort $\chi_{\perp}(0) = \infty$, was sofort anschaulich klar ist: die Magnetisierung kann wegen der unendlichen Entartung der Minima des Landau–Funktionals ohne Probleme (d.h. mittels eines verschwindend kleinen Magnetfelds) transversal zum ursprünglichen \mathbf{m} um einen endlich großen Winkel rotiert werden.

Bisher war **m** räumlich homogen. Wir untersuchen nun kleine Fluktuationen um eine räumlich homogene spontane Magnetisierung $\mathbf{m} = m\mathbf{n}$, indem wir

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = m(\mathbf{n}(1+\phi_{\parallel}) + \vec{\phi}_{\perp}) \tag{4.8}$$

schreiben. Entwickeln des Landau–Funktionals für ${\bf h}=0$ liefert dann für kleine $\phi_{\parallel},\phi_{\perp}$

$$L[\phi_{\parallel},\phi_{\perp}] = L[\mathbf{m}] + \frac{m^2}{2} \int d^d \mathbf{x} \left[K(\nabla \phi_{\parallel}(\mathbf{x}))^2 + 2t\phi_{\parallel}^2 + K(\nabla \phi_{\perp}(\mathbf{x}))^2 \right].$$
(4.9)

Das Interessante ist hieran der Anteil

$$L_{\perp}[\phi_{\perp}] \equiv \frac{Km^2}{2} \int d^d \mathbf{x} (\nabla \phi_{\perp}(\mathbf{x}))^2$$
(4.10)

der Fluktuationen senkrecht zur räumlich homogenen spontanen Magnetisierung $\mathbf{m} = m\mathbf{n}$ beschreibt. Zunächst existiert dieser Anteil –im Gegensatz zum longitudinalen Anteil – nur für $T < T_c(t < 0)$, also in der symmetriegebrochenen Phase. Dieser Anteil

beschreibt die zusätzliche positive Energie, die räumliche Fluktuationen senkrecht zu **m** kosten. Diese Energie führt dazu, dass das System versucht, solchen Fluktuationen entgegenzuwirken, analog zur Rückstellkraft in kleinen Gitterschwingungen (Phononen) hin zur Ruhelage. Der Parameter Km^2 wird deshalb als Steifigkeit ('stiffness') bezeichnet, die zugehörigen Fluktuationsmoden als *Goldstone–Moden*.

Schließlich erkennen wir auch, dass die Energie umso kleiner ist, je langwelliger die Fluktuation ist: für den homogenen Fall hatten wir ja gerade argumentiert, dass eine Rotation senkrecht zu **m** energietisch nichts kostet. Goldstone-Moden sind also Anregungen mit einem Spektrum $\omega(\mathbf{k})$ ohne Lücke ('gap'), d.h. es gilt $\omega(\mathbf{k} \to 0) \to 0$,

Beispiele für Goldstone–Moden sind Phononen in Festkörpern (s.u.) oder Spinwellen in Ferromagneten (siehe SKRIPT QUANTENMECHANIK II). Goldstone–Moden sind allgemein kollektive, nieder–energetische Anregungen eines Systems mit spontan gebrochener Symmetrie.

4.2.1 Beispiel: Festkörper als elastische Medien

(SKRIPT Festkörpertheorie) In der **Elastizitätstheorie** ersetzt man dann die Auslenkungen $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ an den diskreten Bravais-Gitterpunkten \mathbf{R} durch ein Auslenkungsfeld (Verschiebungsfeld) mit kontinuierlicher Ortsvariable $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$,

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}) \to \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad \text{Verschiebungsfeld} ,$$
 (4.11)

Die kinetische Energie im Bravais-Gitter läßt sich schreiben als

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}} M(\mathbf{R}) \dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{R}} M(\mathbf{R}) \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{r})$$
(4.12)

Hierin ersetzen wir nun die 'gekörnte' Massendichte $\rho_M(\mathbf{r})$ durch eine konstante, mittlere Massendichte ρ_M des Mediums,

$$\rho_M(\mathbf{r}) \equiv \sum_{\mathbf{R}} M(\mathbf{R}) \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}) \to \rho_M, \qquad (4.13)$$

und wir erhalten dementsprechend für die kinetische Energie

$$T = \frac{1}{2}\rho_M \int d\mathbf{r} \dot{\mathbf{u}}^2(\mathbf{r}). \tag{4.14}$$

Die potentielle Energie U ist im Bravais-Gitter durch die Doppelsumme

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} \mathbf{u}(\mathbf{R}) D(\mathbf{R} - \mathbf{R}') \mathbf{u}(\mathbf{R}')$$
(4.15)

gegeben, was ein entsprechendes Doppelintegral im kontinuierlichen Fall bedeuten würde. Allerdings ist das noch etwas zu allgemein. Im Bravais-Gitter sind z.B. üblicherweise nur benachbarte oder übernächste Nachbarn (MADELUNG I) miteinander gekoppelt. In der linearen Kette haben wir $U = \frac{1}{2}K\sum_{n=1}^{N} [u_n - u_{n+1}]^2$. Die Differenz $u_n - u_{n+1}$ legt nahe, dass nur (erste) Ableitungen von \mathbf{u} in den Ausdruck für die potentielle Energie des elastischen Mediums eingehen sollten. Wir schreiben die Matrix der ersten Ableitungen von \mathbf{u} als

$$\frac{\partial u_i}{\partial r_j} \equiv \varepsilon_{ij} + \omega_{ij}, \quad \varepsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right), \quad \omega_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} - \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right). \tag{4.16}$$

Die Volumenänderung eines kleinen Quaders $Q(\mathbf{r})$ um den Punkt \mathbf{r} mit Seitenflächen A (Normale $d\mathbf{f}$)ist (kartesische Koordinaten)

$$\lim_{A \to 0} A \sum \mathbf{u}(\mathbf{r}) d\mathbf{f} = \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{r}) = \operatorname{Tr} \varepsilon(\mathbf{r}).$$
(4.17)

Die Spur des Verzerrungstensors

$$\varepsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right), \quad \text{Verzerrungstensor}$$
(4.18)

beschreibt deshalb eine Volumenänderung des Mediums, sie ist unabhängig vom Koordinatensystem. Andererseits hat der antisymmetrische Tensor ω_{ij} Spur Null. Für die potentielle Energie, die nur von der Volumenänderung des Mediums abhängen soll, setzen wir deshalb

$$U = U[\varepsilon_{ij}] \tag{4.19}$$

an. Weiterhin wollen wir bei der harmonischen Näherung kleiner Verschiebungen bleiben, U soll also höchstens quadratisch von den ε_{ij} abhängen.

Die größte Einschränkung kommt nun, wenn wir uns auf ein *isotropes* Medium beschränken, dass in alle Raumrichtungen völlig gleich aussieht. Aus dem symmetrisch Tensor lassen sich dann zwei unabhängige, quadratische Skalare bilden, z.B. [Tr $\varepsilon(\mathbf{r})$]² und $\sum_{ij} \varepsilon_{ij}^2$: Diese Größen sind völlig unabhängig von der Wahl der Basis, d.h. beim Übergang $\varepsilon_{ij} \to \varepsilon'_{ij} \equiv U_{ik} \varepsilon_{kl} U_{lj}^{\dagger}$ durch eine Rotation U ändern sie sich nicht, wie es für einen isotropen Körper der Fall sein sollte.

FRAGE: Warum gibt es (in d = 3) nur zwei solcher unabhängigen Größen.

Die potentielle Energie ist dann die Summe aus Termen, die hierzu proportional sind,

$$U = \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\lambda_L \varepsilon_{ii}(\mathbf{r}) \varepsilon_{jj}(\mathbf{r}) + 2\mu_L \varepsilon_{ij}^2 \right)$$
(4.20)

mit den Lamé-Konstanten λ_L und μ_L , die mit den zwei Schallgeschwindigkeiten des Mediums (longitudinal und transversal, s.u.) zusammenhängen. Insbesondere ist der Anteil $2\mu_L \varepsilon_{ij}^2$ für die Existenz von *Scherkräften* im Festkörper verantwortlich (SKRIPT Festkörpertheorie unter Spannungstensor), die es in der flüssigen Phase nicht gibt. In dieser Sichtweise ist das obige *U* also das quadratisch entwickelte Landau–Funktional der Fluktuationen (Goldstone–Moden) in der Phase des 'Fluides', dessen kontinuierliche Translations–Invarianz spontan symmetriegebrochen ist, also in der festen Phase.

4.2.2 Mermin–Wagner–Theorem

Die Goldstone–Moden führen in Systemen mit kontinuierlicher Symmetrie dazu, dass ein geordneter Zustand bei endlichen Temperaturen für Dimensionen $d \leq 2$ gar nicht existieren kann (Mermin–Wagner–Theorem): die transversalen Fluktuationen um einen möglichen endlichen Wert **m** des Ordnungsparameters sind dann einfach zu stark. (GOL-DENFELD) In Gaußscher Näherung ist die Korrelationsfunktion für solche Fluktuationen

$$g_{\perp}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{k^2},\tag{4.21}$$

was für $d \leq 2$ eine Infrarotdivergenz hat. Der Beweis des Mermin–Wagner–Theorems ist allerdings allgemein und benutzt die Gaußsche Näherung nicht, vgl. z.B. das Lehrbuch von UEDA.

Die Dimension d = 2 wird als *untere kritische Dimension* für Systeme mit kontinuierlicher Symmetrie bezeichnet. Der Fall d = 2 spielt eine Sonderrolle und wird im nächsten Kapitel behandelt.

4.3 Das XY-Modell

Wir betrachten im Folgenden das O(2)-Gittermodell

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$
(4.22)

mit n = 2-komponentigem Spin, und zwar auf einem Quadratgitter mit NN-Wechselwirkung in d = 2 Dimensionen. Das Skalarprodukt $\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j$ ist hier bereits wegen $|\mathbf{S}_i| = 1$ durch den Kosinus der Differenz der Winkel der Spins ausgedrückt. Die Zustandssumme ist

$$Z = \int_0^{2\pi} d\theta_1 \dots \int_0^{2\pi} d\theta_N \prod_{\langle ij \rangle} e^{K \cos(\theta_i - \theta_j)}, \quad K \equiv \beta J.$$
(4.23)

Im Folgenden wollen wir die Korrelationsfunktion der Winkel zweier Spins an zwei festen Stellen 0 und p berechnen,

$$\langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_p \rangle = \langle \cos(\theta_0 - \theta_p) \rangle. \tag{4.24}$$

4.3.1 Der Grenzfall hoher Temperaturen

(KARDAR) Für Temperaturen $T=\beta^{-1}\gg J$ entwickeln wir die Exponentialfunktion und schreiben

$$\langle \cos(\theta_0 - \theta_p) \rangle = \frac{1}{Z} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \dots \int_0^{2\pi} d\theta_N \cos(\theta_0 - \theta_p) \prod_{\langle ij \rangle} \left[1 + K \cos(\theta_i - \theta_j) + O(K^2) \right] (4.25)$$

Selbst in erster Ordnung in K ist das nicht einfach zu berechnen. Das Produkt $\prod_{\langle ij \rangle} [1 + K \cos(\theta_i - \theta_j)]$ gibt ausmultipliziert eine Summe von vielen Termen. Zu jedem dieser Terme trägt jede NN-Verbindung ij ('bond') im Gitter entweder trivial mit 1 oder $K \cos(\theta_i - \theta_j)$ bei. Wir können solch einen Term durch einen Graphen auf dem Gitter darstellen, in dem die nicht-trivial beitragenden bonds z.B. durch eine dicke Linie gezeichnet sind. Ein solcher Graph entspricht dann z.B. dem Integranden $\cos(\theta_0 - \theta_p)[K \cos(\theta_3 - \theta_4)K \cos(\theta_4 - \theta_5)...]$, wobei natürlich eine bestimmte Nummerierung der Gitterplätze festgelegt sein muss. Wichtig ist nun aber die einfache Eigenschaft der Integrale

$$\int_0^{2\pi} d\theta \cos(\theta - \theta') = 0, \quad \int_0^{2\pi} d\theta' \cos(\theta - \theta') \cos(\theta' - \theta'') = \frac{1}{2} \cos(\theta - \theta''). \quad (4.26)$$

Dadurch sind nur solche Terme in Gl. (4.25) von Null verschieden, in denen die 'äußeren' Punkte 0 und p durch einen Pfad von bonds miteinander verbunden sind, also z.B. in einem Term $\cos(\theta_0 - \theta_p)[K\cos(\theta_0 - \theta_1)K\cos(\theta_1 - \theta_2)...K\cos(\theta_n - \theta_p)]$ mit n + 1beitragenden bonds, der bei Integration gerade $(K^{n+1}/2^n) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_0 d\theta_p \cos^2(\theta_0 - \theta_p) = (K/2)^{n+1}$ ergibt.

Für die Hochtemperatur-Entwicklung benötigen wir die kleinsten Potenzen von K, also die Graphen mit den wenigsten bonds. Für gegebene äußere Gitterplätze 0 und p mit Abstand r sind das also 'Geodäten', d.h. solche mit den kürzesten Pfaden zwischen 0 und p, für die dann in etwa $na \approx r$, wobei a die Gitterkonstante ist. Diese grobe Abschätzung ² führt also auf

$$\langle \cos(\theta_0 - \theta_p) \rangle \approx \left(\frac{K}{2}\right)^{r/a} \equiv e^{-r/\xi}, \quad \xi \equiv \frac{a}{\log(2/K)}.$$
 (4.27)

Wir bekommen also eine exponentiell mit dem Abstand r abfallende Korrelationsfunktion, wie wir es auch wegen der großen Fluktuationen bei hohen Temperaturen erwarten: die Spins sind dann schon über wenige Korrelationslängen ξ hinweg praktisch nicht mehr miteinander korreliert.

4.3.2 Der Grenzfall tiefer Temperaturen

Bei niedrigen Temperaturen hat man zunächst die Vorstellung einer ferromagnetischen Phase (was sich in d = 2 Dimensionen als falsch herausstellen wird), mit kleinen Fluktuationen θ_i um einen festen Wert. Zumindest erscheint es plausibel, dass sich bei kleinen Temperaturen die Winkel θ_i relativ langsam wellenförmig ändern, wenn man durch das Gitter wandert. Man macht deshalb die 'grobe Vereinfachung' $\cos(\theta_i - \theta_j) \rightarrow 1 - \frac{1}{2}(\theta_i - \theta_j)^2$ und diskutiert das Spinwellen-Modell

$$H_{\rm SW} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\theta_i - \theta_j)^2.$$
(4.28)

 $^{^2}$ Damit das Sinn macht und $\xi>0,$ muss also zumindes
tK<2gelten, was wegen $T\gg J$ auf jeden Fall erfüllt ist.

Hier wurde der triviale konstante Term in der Entwicklung des Kosinus weggelassen. Unabhängig vom zugrundeliegenden XY-Modell kann man H' natürlich auch als ein eigenständiges Modell analysieren. Es erweist sich als bequem, die θ_i nicht mehr als Winkel, sondern als reelle Variablen $-\infty < \theta_i < \infty$ aufzufassen.

AUFGABE: Leite Korrelationsfunktion für das Modell H_{SW} (Gitterkonstante a), Gl. (4.28) her:

$$G(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) \equiv \langle \theta_i \theta_j \rangle = \frac{a^2}{\beta J} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}}{4 - 2\cos(k_x a) - 2\cos(k_y a)}.$$
 (4.29)

Hinweis: Beachte, dass die Summe in Gl. (4.28) über nächste Nachbarpaare läuft.

Da Gl. (4.28) ein in den Variablen θ_i quadratisches Modell ist, handelt es sich also um Gaußsche Korrelationen. Entsprechend können wir damit die eigentlich für das XY-Modell gesuchte Korrelationsfunktion, nämlich $\langle \cos(\theta_0 - \theta_p) \rangle$, Gl. (4.24), mit Hilfe des quadratischen Modells approximieren, d.h.

$$\langle \cos(\theta_0 - \theta_p) \rangle_{\rm SW} = \langle e^{i(\theta_0 - \theta_p)} \rangle \approx \langle e^{i(\theta_0 - \theta_p)} \rangle_{\rm SW} = e^{-\frac{1}{2} \langle (\theta_0 - \theta_p)^2 \rangle_{\rm SW}}.$$
 (4.30)

Die letzte Gleichung gilt, weil H_{SW} quadratisch ist. Explizit liefert das unter Benutzung von Gl. (4.29)

$$\langle \cos(\theta_0 - \theta_p) \rangle_{\rm SW} = \exp\left(\frac{1}{\beta J} \bar{G}(\mathbf{R}_0 - \mathbf{R}_p)\right)$$
$$\bar{G}(\mathbf{r}) \equiv a^2 \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - 1}{4 - 2\cos(k_x a) - 2\cos(k_y a)}.$$
(4.31)

Wenn wir jetzt einen Kontinuumslimes $a \to 0$ durchführen, wird das zu

$$\langle \cos(\theta_0 - \theta_p) \rangle_{\rm SW} \approx \exp\left[\frac{1}{\beta J} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_0 - \mathbf{R}_p)} - 1}{\mathbf{k}^2}\right].$$
 (4.32)

Entsprechend wird die Funktion $G(\mathbf{r})$ zu

$$\bar{G}(\mathbf{r}) \approx \int_0^\Lambda \frac{dkk}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \frac{e^{ikr\cos\phi} - 1}{k^2} = \int_0^\Lambda \frac{dk}{2\pi} \frac{J_0(kr) - 1}{k}, \qquad (4.33)$$

wobei wir das **k**-Integral über die Brillouin-Zone des Gitters durch ein Integral über eine Kreisfläche mit Abschneideparameter $\Lambda \approx a^{-1}$ in der Obergrenze des *k*-Integrals approximiert haben. Der Ausdruck $J_0(kr)$ ist die Bessel-Funktion nullter Ordnung.

Wir haben $\bar{G}'(\mathbf{r}) \approx \frac{J_0(r/a)-1}{2\pi r} \rightarrow -\frac{1}{r}$ für $r \rightarrow \infty$, und damit

$$\bar{G}(\mathbf{r}) \approx -\frac{1}{2\pi} \log \frac{r}{a} + c. \tag{4.34}$$

Um die Konstante c zu berechnen, muss mehr Aufwand betrieben werden (ITZYKSON/DROUFFE), es ergibt sich $c \approx -\frac{1}{4}$.

Für große $r \equiv |\mathbf{R}_0 - \mathbf{R}_p| \gg \Lambda^{-1}$ folgt

4. Kontinuierliche Symmetrien

$$\langle \cos(\theta_0 - \theta_p) \rangle \approx r^{-\eta}, \quad \eta = \frac{k_B T}{2\pi J}.$$
 (4.35)

Das ist ein erstaunliches Ergebnis: die Korrelationsfunktion zerfällt algebraisch, und zwar mit einem *Temperatur-abhängigem* kritischen Exponenten η (der Exponent η ist dabei wie üblich über das Abfallen der Korrelationsfunktion $g(r) \propto r^{2-d+\eta}$ definiert mit d = 2hier).

(LE BELLAC) Eine interessante Analogie entsteht durch Vergleich mit dem elektrostatischen Potential einer unendlich langen Linienladung mit Dichte λ senkrecht durch den Ursprung einer zweidimensionalen Ebene mit einem Potential $\Phi(\mathbf{r})$, das die Poissongleichung erfüllt,

$$-\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) = \lambda \delta(\mathbf{r}). \tag{4.36}$$

Das entsprechende elektrische Feld \mathbf{E} folgt durch Anwendung des Gaußschen Gesetzes (Zylinder um die Linienladung legen);

$$\mathbf{E}(r) = \frac{\lambda}{2\pi r\varepsilon_0}.\tag{4.37}$$

Das zugehörige Potential $\Phi(\mathbf{r})$ folgt durch Integration also zu $\Phi(\mathbf{r}) = -\frac{\lambda}{2\pi\varepsilon_0} \ln r + \Phi_0$ mit einer Konstanten Φ_0 , in Analogie zu Gl. (4.34).

4.3.3 Wirbel, Berezinskii–Kosterlitz–Thouless–Übergang

(GOLDENFELD/AUFGABE) Statt des diskreten Spinwellen-Hamiltonians H_{SW} können wir dann auch gleich mit einem entsprechenden kontinuierlichen Modell beginnen, in dem $\theta(\mathbf{r})$ als Feld auftritt, nämlich

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2. \qquad (4.38)$$

Weil wir in zwei Dimensionen sind, können wirbelförmige Konfigurationen der Spins auftreten (SKIZZE). In Polarkoordinaten sei z.B. der Winkel der Spins in einem Wirbel um den Ursprung $\theta(\mathbf{r}) = \frac{\pi}{2} + \phi$. Dann gilt (LE BELLAC)

$$\nabla \theta(\mathbf{r}) = \mathbf{e}_r \frac{\partial \theta}{\partial r} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial \phi} = \frac{\mathbf{e}_\phi}{r}.$$
(4.39)

Die Energie eines solchen Wirbels ist dann

$$E = \frac{J}{2} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2 \approx \frac{J}{2} 2\pi \int_a^L dr r \frac{1}{r^2} = \pi J \ln \frac{L}{a}, \qquad (4.40)$$

wobei hier bei einer Gitterkonstanten a abgeschnitten und bis zur Systemgröße L integriert wird.

Jetzt kann man mit einem einfachen Entropieargument die thermodynamische Rolle der Wirbel abschätzen: Da die Wirbelzentren irgendwo sitzen können, ist die Entropie $S \approx \ln(L/a)^2$, die freie Energie also $F = E - TS = (\pi J - 2T) \ln(L/a)$. Bei tiefen Temperaturen $T < T_c \equiv \pi J/2$ führen die Wirbel (die tatsächlich immer in Paaren auftreten) nur zu einer Erhöhung der Energie, was für die Minimierung der freien Energie also ungünstig ist. Bei höheren Temperaturen hingegen wird die Entropie immer wichtiger, und die Wirbel beginnen, die Tieftemperatureigenschaften (Spinwellen) immer mehr zu zerstören, bis bei T_c ein Übergang zu höheren Tempraturen hin erfolgt (*Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Übergang*), für die dann Korrelationsfunktionen nicht mehr algebratisch wie in Gl. (4.35) sondern exponentiell wie in Gl. (4.27) abfallen.

4.4 Herleitung des Coulomb-Gas-Modells

Das Problem der Tieftemperatur-Entwicklung war der Verlust der Winkel-Periodizität in der Approximation Gl. (4.28). In der Zustandssumme Z, Gl. (4.23), treten die Winkel in den Faktoren $e^{\beta J \cos(\theta_i - \theta_j)}$ auf. Wir können diese Ausdrücke in eine periodische Fourierreihe entwickeln (wir setzen für einen Moment J = 1), in dem wir von

$$e^{\beta\cos\theta} = I_0(\beta) \left(1 + \sum_{n \neq 0} \frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)} e^{in\theta} \right)$$
(4.41)

ausgehen, wobei

$$I_n(\beta) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{-in\theta} e^{\beta \cos \theta}, \quad \text{modifizierte Besselfunktion.}$$
(4.42)

Für kleine Temperaturen $\beta \gg 1$ wird jetzt

$$\lim_{\beta \to \infty} \frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)} \sim e^{-\frac{n^2}{2\beta}} \left(1 + O(n/\beta)^2 \right), \tag{4.43}$$

benutzt, ³ und die Zustandssumme

$$Z = \int_{0}^{2\pi} d\theta_{1} \dots \int_{0}^{2\pi} d\theta_{N} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta \cos(\theta_{i} - \theta_{j})} \to I_{0}^{2N}(\beta) Z_{V}(\beta)$$
$$Z_{V}(\beta) \equiv \int_{0}^{2\pi} d\theta_{1} \dots \int_{0}^{2\pi} d\theta_{N} \prod_{\langle ij \rangle} z(\theta_{i} - \theta_{j}) \quad z(\theta) \equiv \sum_{n = -\infty}^{\infty} e^{-\frac{n^{2}}{2\beta}} e^{in\theta}. \quad (4.44)$$

Der unwichtige Faktor I_0^{2N} (wobei 2N die Anzahl der NN-Plätze ist) ist hier bereits von der Zustandssumme Z_V des *Villain-Modells* abgespalten. Wegen der weggelassenen $O(n/\beta)^2$ ist also völlig unklar, wie gut Z_V das XY-Modell beschreibt.

³ Die asymptotische Entwicklung gibt zunächst $I_n(z) = \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} \left[1 - \frac{4n^2 - 1}{8z} + \frac{(4n^2 - 1)(4n^2 - 9)}{2!(8z)^2} - \dots \right]$

Trotzdem wollen wir im Folgenden Z_V genauer analysieren. Die Winkelintegration in Z_V über die nächsten Nachbarn eines festen Spins j führt zu

$$\int_{0}^{2\pi} d\theta_j e^{in_{1j}(\theta_1 - \theta_j) + in_{j3}(\theta_j - \theta_3) + in_{2j}(\theta_2 - \theta_j) + in_{j4}(\theta_j - \theta_4)} = \delta_{0, -n_{1j} + n_{j3} - n_{2j} + n_{j4}}, \quad (4.45)$$

wenn wir für den Moment mit 1, 2, 3, 4 die NN des festen Spin j bezeichnen (SKIZZE) und die n_{ij} die Summationsindizes in $z(\theta_i - \theta_j)$ bezeichnen, wobei zu jedem NN-bond ein n_{ij} gehört. Die Bedingung $-n_{1j} + n_{j3} - n_{2j} + n_{j4} = 0$ kann als 'diskrete' Divergenz aufgefasst werden: in den Platz j 'fliesst genauso viel hinein wie hinaus'. ⁴ Damit gilt also

$$Z_V(\beta) = \sum_{n_{ij}}' e^{-\sum_{\langle ij \rangle} \frac{n_{ij}^2}{2\beta}},$$
(4.47)

wobei die Summe durch die Divergenzbedingungen, d.h. Bedingungen vom obigen Typ $-n_{1j} + n_{j3} - n_{2j} + n_{j4} = 0$ für alle NN zu einem festen Platz *j* eingeschränkt ist. Wir können das nun weiterhin vereinfachen durch die Analogie zur Divergenz im kontinuierlichen Fall. Hierzu definieren wir auf einer Plakette um den Platz *j* einen gerichteten Kreis und in den vier Quadranten um *j* die Variablen m_1, m_2, m_3, m_4 (SKIZZE), so dass die Bond-Variable immer durch die Differenz der *m*s links minus rechts (für herausfliessende Bonds) und rechts minus links (für hineinfliessende Bonds) auf dem Kreis gegeben ist. Das führt auf

$$(m_4 - m_3) + (m_1 - m_4) + (m_2 - m_1) + (m_3 - m_2) = n_{j4} - n_{1j} - n_{2j} + n_{j3} = 0, (4.48)$$

wie es sein soll.

Insgesamt kann so das gesamte Gitter plakattiert werden: Der Anbau z.B. rechts von n_{j3} mit zwei neuen Quadranten gibt drei neue Bonds um $\mathbf{R}_j + a\mathbf{e}_x$, von denen wegen der Divergenzbedingung aber nur zwei unabhängig sind, weshalb man nur zwei neue m-Variablen braucht. Ausgedrückt in m-Variablen folgt

$$Z_V(\beta) = \sum_{\{m_a\}} e^{-\sum_{\langle ab \rangle} \frac{(m_a - m_b)^2}{2\beta}}.$$
(4.49)

DISKUSSION RAUHIGKEITSÜBERGANG.

Im nächsten Schritt wird das jetzt mit der Poissonschen Summenformel

⁴ Mit der Definition $(n_{j3}, n_{j4}) \equiv (n_x(\mathbf{R}_j), n_y(\mathbf{R}_j)) \equiv \mathbf{n}(\mathbf{R}_j)$ sowie $n_{1j} \equiv n_x(\mathbf{R}_j - a\mathbf{e}_x)$ und $n_{2j} \equiv n_y(\mathbf{R}_j - a\mathbf{e}_y)$ folgt im Limes $a \to 0$

$$(n_{j3} - n_{1j}) + (n_{j4} - n_{2j}) = n_x(\mathbf{R}_j) - n_x(\mathbf{R}_j - a\mathbf{e}_x) + n_y(\mathbf{R}_j) - n_y(\mathbf{R}_j - a\mathbf{e}_y) \rightarrow a\partial_x n_x(\mathbf{R}_j) + a\partial_y n_y(\mathbf{R}_j) = a\nabla \mathbf{n}(\mathbf{R}_j).$$

$$(4.46)$$

4. Kontinuierliche Symmetrien

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \int_{-\infty}^{\infty} d\phi f(\phi) \sum_{q=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i q \phi}$$
(4.50)

umgeformt als

$$Z_V(\beta) = \sum_{\{q_a\}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_a d\phi_a e^{-\sum_{\langle ab \rangle} \frac{(\phi_a - \phi_b)^2}{2\beta} + 2\pi i \sum_a q_a \phi_a}.$$
 (4.51)

Im (vorläufig) letzten Schritt können nun die Gaußschen Integrale mit Hilfe von Gl. (B.6) ausgeführt werden. Wir können hier direkt auf die Rechnungen mit dem Spinwellen-Hamiltonian H_{SW} , Gl. (4.28) zurückgreifen und erhalten

$$Z_V(\beta) = Z_{SW}(1/\beta) \sum_{\{q_a\}} e^{-2\pi^2 \beta^2 \sum_{\langle ab \rangle} q_a G(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)q_b},$$
(4.52)

wobei $Z_{SW}(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{a} d\phi_{a} \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_{\langle ab \rangle} (\phi_{a} - \phi_{b})^{2}\right)$ gerade die Zustandssumme des Spinwellen-Hamiltonians H_{SW} ist und $G(\mathbf{R}_{a} - \mathbf{R}_{b})$ die Korrelationsfunktion Gl. (4.29) bezeichnet.

4.4.1 Analyse des Coulomb-Gas-Modells

Im nächsten Schritt wertet man nun Z_V in Gl. (4.52) aus, indem man das Ergebnis Gl. (4.34) für \overline{G} benutzt;

$$Z_V(\beta) \approx Z_{SW}(1/\beta)Z_C(\beta)$$
$$Z_C(\beta) \equiv \sum_{\{q_i\}}' \exp\left(-\frac{\pi^2 J\beta}{2}\sum_i q_i^2 + \pi\beta J \sum_{i\neq j} q_i \log|(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)/a|q_j\right), \quad (4.53)$$

wobei wir J wieder eingefügt haben und a die Gitterkonstante ist. (Herleitung als AUF-GABE s.u.). Dieses Ergebnis ist insofern approximativ, als dass wir nur eine asymptotische Darstellung der Greenschen Funktion \overline{G} benutzt haben.

Die Zustandssumme $Z_C(\beta)$ ist die Zustandssumme eines Systems von Ladungen $2\pi\sqrt{J}q_i$ an den Plätzen \mathbf{R}_i auf einem zweidimensionalen Gitter, wobei Ladungsneutralität

$$\sum_{i} q_i = 0 \tag{4.54}$$

gilt (Strich an der Summe). Im Term $\frac{\pi^2 J\beta}{2} \sum_i q_i^2 \equiv \mu \beta \sum_i q_i^2$ wir hierbei formal ein chemisches Potential μ eingeführt, so dass $Z_C(\beta)$ eine großkanonische Zustandssumme wird. Traditionell definiert man μ etwas um mit einer Variablen y,

$$-\frac{\pi^2\beta}{2} \equiv \log y. \tag{4.55}$$

Für $y \to 0$ wird der log negativ und der Term $\exp(\log y \sum_i q_i^2)$ unterdrückt in der Zustandssumme Konfigurationen mit großem $\sum_i q_i^2$, d.h. mit betragsmäßig hohen Ladungen (die q_a sind ja ganze Zahlen) bzw. mit vielen Ladungen, die z.B. in entgegengesetzt geladenen Paaren auftreten.

Von solche Paaren treten für y also nur sehr wenige auf. Den größten Beitrag zu $Z_C(\beta)$ werden solche Paare geben, für die $q_i \log |(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)/a|q_j$ möglichst groß wird, für $q_i = -q_i$ ist das also für möglichst kleinen Abstand $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ der Fall (beachte, dass immer $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| > a$ gelten muss), man hat quasi gebundene 'Dipol-Paare'. Für größeres y bekommt man dagegegen Konfigurationen mit immer mehr Ladungen, und das Bild von wenigen Dipolen geht über in das eines Plasmas aus vielen freien Ladungen.

Die Ladungen q_i in $Z_C(\beta)$ werden jetzt für die folgende Diskussion mit den Wirbelstärken der Wirbel im ursprünglichen Spinmodell identifiziert. Wir betrachten den Fall $y \to 0$ mit Konfigurationen ohne Wirbel bzw. einem einzigen Wirbelpaar mit $q = \pm 1$ für einen Wirbel um $\mathbf{R} = \mathbf{x}$ und einen Wirbel um $\mathbf{R} = \mathbf{z}$. Von der Zustandssumme bleiben dann die Terme 1 (alle $q_i = 0$) und ein Term von den Wirbeln, die irgendwo sitzen können

$$Z_{C}(\beta, y) = 1 + \sum_{\mathbf{x}\neq\mathbf{z}} e^{2\ln y} e^{-2\pi\beta \log |(\mathbf{x}-\mathbf{z})/a|}$$

$$\rightarrow 1 + \frac{y^{2}}{a^{4}} \int \int d^{2}\mathbf{x} d^{2}\mathbf{z} \theta(|\mathbf{x}-\mathbf{z}| - \Lambda^{-1}) \left| \frac{a}{\mathbf{x}-\mathbf{z}} \right|^{2\pi\beta} \equiv Z_{C}(\beta, y; \Lambda^{-1})$$

$$(4.56)$$

Im letzten Schritt haben wir einen Kontinuumslimes vollzogen, wobei die Stufenfunktion sicherstellt mit Cutoff Λ^{-1} , dass die Wirbel sich nicht näher als *a* kommen.

Wir fordern, dass die Physik nicht wesentlich von diesem Cutoff beeinflußt wird: wenn wir $\Lambda^{-1} = as$ schreiben (Reskalierung von einem Cutoff *a* mit einem Skalenparameter *s*), soll

$$Z_C(\beta, y; a) = Z_C(\beta', y'; as) \tag{4.57}$$

gelten, d.h. wir wollen dieselben Zustandssummen erhalten, wenn auch mit möglicherweise veränderten Kopplungsparametern (unsere dimensionslosen Parameter sind hier y und β , wenn wir J = 1 setzen).

Wir haben hier also wieder die Idee der Renormierungsgruppe angewendet. Durch Variablensubstitution sehen wir, dass

$$y' = ys^{2-\pi\beta}, \quad \beta' = \beta. \tag{4.58}$$

Die Interpretation ist hier die Folgende: für Temperaturen unterhalb von $T_c = \pi J/2$ wird y unter der Renormierungsgruppe gegen y = 0 skalieren, d.h. es werden immer weniger Ladungen (Wirbelpaare) auftreten und wir kommen wieder bei unserer Spinwellentheorie an. Umgekehrt wächst für Temperaturen oberhalb von $T_c = \pi J/2$ der Parameter y an, und es gibt immer mehr Wirbel.

Tatsächlich gibt es neben der RG–Gleichung Gl. (4.58) noch eine weitere, die Abschirmungseffekte der Ladungen im Coulombgas-Modell beschreibt. Beide Gleichungen für T(s) (Temperatur) und y(s) (Fugazität) sind gekoppelt und lauten

$$\frac{\partial y^2}{\partial \ln s} = 2\left(2 - \frac{\pi J}{T}\right)y^2$$

$$\frac{\partial T}{\partial \ln s} = y^2.$$
(4.59)

In der $y\operatorname{-}{\mathrm{T-Ebene}}$ wird durch sie das berühmte Kosterlitz-Thouless-Flußdiagram beschrieben.

AUFGABE: Benutze das Ergebnis Gl. (4.34) für \overline{G} für die folgenden Herleitungen.

a) Zeige, dass in $Z_V(\beta)$, Gl. (4.52), im Limes Systemgröße $L \to \infty$ Ladungserhaltung Gl. (4.54) gelten muss.

b) Leite das Ergebnis Gl. (4.53) für $Z_C(\beta)$ her.

c) Zeige, dass die effektiven Ladungen in $Z_C(\beta)$ den Wert
 $2\pi\sqrt{J}q_i$ haben.

5. DISSIPATION UND NICHTGLEICHGEWICHT

5.1 Die Brownsche Bewegung

(SKRIPT THERMODYNAMIK) Die Deutung der Brownschen Molekularbewegung ist ein wichtiger Meilenstein der statistischen Mechanik.

Ein 'großes' Teilchen (Brownsches Teilchen, 'System') bewege sich unter dem Einfluß der Wechselwirkung mit vielen 'kleinen' Teilchen ('Bad'). Beobachtet man ein einzelnes Brownsches Teilchen, so findet man eine stochastisch irreguläre Trajektorie. Beobachtet man ein Ensemble von vielen Brownschen Teilchen, so betrachtet man statt einer einzelnen Trajektorie x(t) besser die Dichte n(x,t) bzw. die Stromdichte j(x,t) der Teilchen. Aus dem phänomenologischen 1. Fickschen Gesetz

$$j(x,t) = -D\nabla n(x,t), \quad 1.$$
 Ficksches Gesetz (5.1)

mit der Diffusionskonstante D folgt mit der Kontinuitätsgleichung

$$\nabla j(x,t) + \dot{n}(x,t) = 0$$
, Kontinuitätsgleichung (5.2)

die Diffusionsgleichung

$$\dot{n}(x,t) = D\Delta n(x,t). \tag{5.3}$$

Statt der Dichte im Ensemble-Bild stellt man jetzt eine entsprechende Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte p(x,t) auf, ein einzelnes Brownsches Teilchen zur Zeit t am Ort x zu finden,

$$\dot{p}(x,t) = D\Delta p(x,t). \tag{5.4}$$

Die Diffusionsgleichung kann man einfach lösen (z.B. durch Fouriertransformation, AUF-GABE oder SKRIPT MATHEMATISCHE METHODEN), z.B. für Deltaförmige Anfangsbedingung $p(t = 0) = \delta(x)$ bei x = 0,

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \quad t > 0.$$
(5.5)

Daraus lassen sich nun Momente und Kumulanten der W-Dichte p(x, t) berechnen, z.B.

$$\langle x \rangle_t = 0, \quad \langle x^2 \rangle_t = 2Dt.$$
 (5.6)

Man hat hier also bereits eine volle statistische Interpretation: das Brownsche Teilchen diffundiert von seinem Ausgangsort weg. Man beachte hier aber den Unterschied zwischen einzelner Trajektorie und dem Ensemblemittel.

5.1.1 Einstein-Relation

Es folgt jetzt eine wichtige (und, wie sich herausstellen wird, tiefer als zunächst ersichtliche) Beziehung zwischen der Diffusionskonstante D und der Beweglichkeit μ des Brownschen Teilchens. Letztere wird folgendermaßen definiert: Auf das Brownsche Teilchen wirke eine externe Kraft F(x). Durch die Wechselwirkung mit den Bad-Teilchen ('Reibung') stellt sich eine konstante Drift-Geschwindigkeit

$$v(x) = \mu F(x)$$
, Beweglichkeit μ (5.7)

ein.

Wir stellen uns jetzt die Kraft durch ein Potential erzeugt vor, z.B. wie in der barometrischen Höhenformel durch ein einfaches Schwerefeld $U(x) = mgx, x \ge 0$. Durch das 'nach-unten-Driften' der Teilchen würde unten die Konzentration n(x) ständig ansteigen, dem wirkt aber die Diffusion von hohen zu niedrigen Dichten nach dem 1. Fickschen Gesetz entgegen. Ein stationäres Dichteprofil n(x) bildet sich aus, falls sich Drift- und Diffusionsstromdichte kompensieren,

$$-Dn'(x) + v(x)n(x) = 0 \rightsquigarrow n(x) = e^{\int_0^x dx' \frac{v(x')}{D}} n_0 = e^{-\frac{\mu}{D}U(x)} n_0,$$
(5.8)

wobei wir im letzten Schritt F(x) = -U'(x) benutzten sowie $n_0 \equiv n(x=0)$ setzen.

Der sich auf diese Weise einstellende Zustand, d.h. das Profil n(x), kann mit einem thermischen Gleichgewichtszustand verglichen werden - hier also mit einem idealen Gas im Potential U(x). Nehmen wir ein kanonisches Ensemble der Temperatur T an, so ergibt sich ein thermisches Profil nach der barometrischen Höhenformel (AUFGABE),

$$n_{\rm th}(x) = e^{-\frac{U(x)}{k_B T}} n_0.$$
(5.9)

An dieser Stelle kann man nun vermuten, dass die dissipative Wechselwirkung der Brownschen Teilchen mit den 'Bad-Teilchen' (es entsteht ja eine Reibung und daher eine konstante Driftgeschwindigkeit) einem Wärmebad mit einer bestimmten Temperature Täquivalent ist, zumindest für nicht zu starke Wechselwirkung, d.h. kleine Kräfte F(x)und somit kleine Reibungseffekte. Der Vergleich der Dichteprofile führt auf

$$D = \mu k_B T$$
, Einstein-Relation. (5.10)

5.1.2 Langevin-Gleichung

Ein weiterer Zugang zur Brownschen Bewegung geht über die Einführung einer stochastischen Kraft $M\xi(t)$ in einer Bewegungsgleichung für die Geschwindigkeit v(t) des Brownschen Teilchens der Masse M, indem man

$$M\dot{v}(t) = -M\gamma v(t) + M\xi(t)$$
, Langevin-Gleichung (5.11)

ansetzt. Hierbei ist γ eine Reibungskonstante und $\xi(t)$ ein stochastischer Prozess, d.h. eine zeitabhängige Zufallsvariable, die die zufälligen Stöße des Brownschen Teilchens mit den Teilchens des Bades modellieren soll.

Man kann sich $\xi(t)$ als eine kontinuierliche Abfolge von Zufallszahlen vorstellen, die alle eine bestimmte Wahrscheinlichkeitsverteilung haben. Diskretisiert man die Zeit t in Zeiten t_i , so bekommt man eine disktrete Folge von Zufallsvariablen $\xi_i \equiv \xi(t_i)$.

BEISPIEL Gaußverteilung: Für eine Zufallsvariable xmit Mittelwert0ist die W-Dichte

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \rightsquigarrow \mathcal{M}(\chi) \equiv \langle e^{i\chi x} \rangle = e^{-\frac{1}{2}\sigma^2\chi^2}, \quad \langle x^2 \rangle = \sigma^2.$$
(5.12)

Die Funktion $\mathcal{M}(\chi)$ heißt Momenten-generierende Funktion oder *charakteristische Funktion*.

Für einen n-dimensionalen Vektor von Zufallsvariablen \mathbf{x} mit Mittelwert 0 ist die W-Dichte für eine Gaußverteilung

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \text{det}\Sigma}} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x}\Sigma^{-1}\mathbf{x}} \rightsquigarrow \mathcal{M}(\mathbf{k}) \equiv \langle e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \rangle = e^{-\frac{1}{2}\mathbf{k}\Sigma\mathbf{k}}, \quad \langle x_i x_j \rangle = \Sigma_{ij}.$$
(5.13)

Die symmetrische, positiv definite Matrix Σ entspricht dem σ^2 im eindimensionalen Fall und heißt *Kovarianz-Matrix*.

Entsprechend ist nun die charakteristische Funktion für einen Gaußschen stochastischen Prozess $\xi(t)$ mit verschwindenden Mittelwerten $\langle \xi(t) \rangle = 0$ gegeben durch

$$\mathcal{M}[\chi(t)] \equiv \langle e^{i \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi(t)\xi(t)} \rangle = e^{-\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt dt' \chi(t) C(t,t') \chi(t')}$$
(5.14)

$$C(t,t') \equiv \langle \xi(t)\xi(t') \rangle, \quad \text{Korrelationsfunktion der stochastischen Kraft.}$$
(5.15)

Für Mittelwert Null ist also alles durch die Korrelationsfunktion $C(t, t') \equiv \langle \xi(t)\xi(t') \rangle$ bestimmt. Der Mittelwert $\langle . \rangle$ ist hier wieder als Ensemblemittelwert zu verstehen, d.h. als Mittelwert über alle Realisierungen der stochastischen Kraft $\xi(t)$.

Wir setzen C(t, t') jetzt so an, dass das Brownsche Teilchen unabhängig von seiner Anfangsgeschwindigkeit im Ensemblemittel einen thermischen Mittelwert für seine kinetische Energie erhält (Äquipartitionstheorem), d.h.

$$\lim_{t \to \infty} M \langle v^2(t) \rangle = k_B T, \quad \text{Äquipartitions theorem} .$$
(5.16)

Hierfür berechnen wir aus der Langevin-Gleichung

$$v(t) = v(0)e^{-\gamma t} + \int_0^t dt' e^{-\gamma(t-t')}\xi(t')$$
(5.17)

und durch Quadrieren unter Ausnutzen von $\langle \xi(t) \rangle = 0$

$$\langle v^2(t)\rangle = \langle v^2(0)\rangle e^{-2\gamma t} + \int_0^t \int_0^t dt' ds e^{-\gamma(t-t')} e^{-\gamma(t-s)} \langle \xi(t')\xi(s)\rangle.$$
(5.18)

Als Ansatz wählen wir

$$\langle \xi(t')\xi(s)\rangle = c\delta(t'-s), \tag{5.19}$$

d.h. unkorrelierte Kräfte zu verschiedenen Zeiten $t' \neq s$. Zu bestimmen bleibt dann die Konstante c:

$$\langle v^{2}(t) \rangle = \langle v^{2}(0) \rangle e^{-2\gamma t} + c \int_{0}^{t} dt' e^{-2\gamma(t-t')} = \langle v^{2}(0) \rangle e^{-2\gamma t} + \frac{c}{2\gamma} \left(1 - e^{-2\gamma t} \right).$$
(5.20)

und damit

$$c = 2\gamma k_B T/M,\tag{5.21}$$

also

$$\langle \xi(t')\xi(s)\rangle = 2\gamma \frac{k_B T}{M} \delta(t'-s).$$
(5.22)

5.1.3 Langevin-Gleichung und Diffusionsgleichung

Ein Zusammenhang zwischen Langevin-Gleichung und Diffusionsgleichung kann sehr einfach im überdämpften Fall ('Smolukowski-Limes')

$$\ddot{x}(t) + \gamma \dot{x}(t) = \xi(t) + f(x,t) \to \dot{x}(t) = \frac{\xi(t) + f(x,t)}{\gamma}$$
(5.23)

hergestellt werden, in der der Beschleunigungsterm $\ddot{x}(t)$ vernachlässigt wird. Hierbei ist f(x,t) eine beliebige deterministische Kraft.

Wenn wir ein freies Brownsches Teilchen betrachten, ist f(x,t) = 0 und es gilt

$$x(t) = \frac{1}{\gamma} \int_0^t dt' \xi(t')$$
 (5.24)

und es folgt

$$\langle e^{i\chi x} \rangle_t \equiv \langle e^{i\chi x(t)} \rangle = \langle e^{i\chi \frac{1}{\gamma} \int_0^t dt' \xi(t')} \rangle = e^{-\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' ds \frac{\chi^2}{\gamma^2} C(t,t')} = e^{-\frac{\chi^2 ct}{2\gamma^2}}.$$
 (5.25)

Die charakteristische Funktion für x(t) ist eine Gauß-Funktion, also ist x(t) wieder ein Gaußscher Prozess. Wir vergleichen mit der Diffusionsgleichung:

$$\langle e^{i\chi x}\rangle_t = \int dx p(x,t) e^{i\chi x} = e^{-\chi^2 Dt}.$$
 (5.26)

Mit $c = 2\gamma k_B T/M$ finden wir also durch Vergleich

$$D = \frac{k_B T}{M\gamma}$$
, Einstein-Relation. (5.27)

Das ist wieder die Einstein-Relation, denn $(M\gamma)^{-1}$ ist mit der Beweglichkeit μ zu identifizieren: in Anwesenheit einer äußeren Kraft F_{ext} sollte gelten

$$M\dot{v} + M\gamma v = F_{\text{ext}} + \xi \rightsquigarrow \langle v_{\text{Drift}} \rangle = \frac{1}{M\gamma} F_{\text{ext}}.$$
 (5.28)

In unserer Smolukowski-Näherung ist die Langevin-Gleichung $\gamma \dot{x}(t) = \xi(t)$ also zur Diffusionsgleichung Gl. (5.3) äquivalent, insbesondere gilt wieder $\langle x^2 \rangle_t = 2Dt$ für alle t > 0. Aus der vollen Langevin-Gleichung Gl. (5.23) findet man (AUFGABE)

$$\langle x^2 \rangle_t = \frac{2D}{\gamma} \left[\gamma t - (1 - e^{-\gamma t}) \right].$$
(5.29)

Für große Zeiten $\gamma t \gg 1$ wird daraus wieder das Diffusions-Ergebnis $\langle x^2 \rangle_t = 2Dt$.

5.2 Kritische Dynamik

Wir versuchen jetzt, die bisher untersuchten kritischen Phänomene (Phasenübergänge) auf den zeitabhängigen Fall zu verallgemeinern. Grob gesagt gibt es hier zwei Vorgehensweisen (CARDY): 1. Dynamik in der Nähe eines kritischen Punktes eines Gleichgewichtsphasenübergangs; und 2. ganz neue Phasenübergänge bei der Untersuchung von stationären Nichtgleichgewichts-Situationen. Wir behandeln hier nur Fall 1.

5.2.1 Zeitabhängige Landau–Ginzburg–Gleichung

(KARDAR, HARDY) Hier ist die Idee, eine Langevin–Gleichung basierend auf einem Landau–Ginzburg–Funktional

$$H[m] = \int d^{d}\mathbf{x} \left[\frac{r}{2}m^{2} + um^{4} + \frac{K}{2}(\nabla m)^{2} \right]$$
(5.30)

zu postulieren. Hierzu betrachten wir noch einmal den Smolukowski-Limes der Langevin-Gleichung Gl. (5.23),

$$\dot{x}(t) = \mu f(x,t) + \eta(t)$$
 (5.31)

mit der Beweglichkeit μ , wobei wir die Masse M = 1 gesetzt und die stochastische Kraft $\eta(t) = \mu \xi(t)$ eingeführt haben.

Wir postulieren jetzt eine Verallgemeinerung von Gl. (5.31) von der Variablen x(t)hin zu einem skalaren Feld $m(\mathbf{x}, t)$, und zwar in der Form

$$\frac{\partial m(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \int d\mathbf{x}' \mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left(-\frac{\delta H[m]}{\delta m(\mathbf{x}')}\right) + \eta(\mathbf{x},t).$$
(5.32)

Die Variationsableitung war uns schon früher in der Herleitung der Landau–Ginzburg– Gleichung begegnet, in dieser zeitabhängigen Variante hier spielt sie also wieder die Rolle der Kraft in der Bewegungsgleichung für das Ordnungsparameterfeld $m(\mathbf{x}, t)$. Gleichzeitig haben wir die räumlich lokale bzw. konstante Mobilität μ auf eine räumlich variierende Funktion $\mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ verallgemeinert.

Das Ausführen der Variationsableitung ergibt die zeitabhängige Landau–Ginzburg–Gleichung

$$\frac{\partial m(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \int d\mathbf{x}' \mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \left(-r - 4um^2(\mathbf{x}',t) + K\nabla^2 \right) m(\mathbf{x}',t) + \eta(\mathbf{x},t).$$
(5.33)

Wir lösen sie hier nur für das Gaußsche Modell, d.h. den exakt lösbaren Fall u = 0. Fouriertransformation liefert zunächst

$$\frac{\partial \hat{m}(\mathbf{q},t)}{\partial t} = -\gamma(\mathbf{q})\hat{m}(\mathbf{q},t) + \hat{\eta}(\mathbf{q},t), \quad \gamma(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{\tau(\mathbf{q})} \equiv \hat{\mu}(\mathbf{q})(r+K\mathbf{q}^2). \tag{5.34}$$

Die Relaxationsrate $\gamma(\mathbf{q})$ bzw. die Relaxationszeit $\tau(\mathbf{q})$ sind jetzt \mathbf{q} -abhängig. Wir setzen für die Korrelationsfunktion der stochastischen Kraft eine Form

$$\langle \hat{\eta}(\mathbf{q},t)\hat{\eta}(\mathbf{q}',t')\rangle = 2D(\mathbf{q})(2\pi)^d \delta^d(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\delta(t-t')$$
(5.35)

an mit einer hier noch zu bestimmenden Funktion $D(\mathbf{q})$, die sich durch die Forderung nach Thermalisierung der Fluktuationen für lange Zeiten bestimmt, d.h.

$$\lim_{t \to \infty} \langle \hat{m}(\mathbf{q}, t) \hat{m}(\mathbf{q}', t) \rangle = \langle \hat{m}(\mathbf{q}) \hat{m}(\mathbf{q}') \rangle_{\text{eq}} = \frac{(2\pi)^d \delta^d(\mathbf{q} + \mathbf{q}') k_B T}{r + K \mathbf{q}^2},$$
(5.36)

wobei die rechte Seite die thermische Gleichgewichtsgröße zur Temperatur T mit dem Hamiltonian H[m] ist. Durch Lösen der Bewegungsgleichung für $\hat{m}(\mathbf{q}, t)$ finden wir

$$\langle \hat{m}(\mathbf{q},t)\hat{m}(\mathbf{q}',t)\rangle = (2\pi)^d \delta^d (\mathbf{q}+\mathbf{q}') \frac{D(\mathbf{q})}{\mu(\mathbf{q})} \frac{1-e^{-2\gamma(\mathbf{q})t}}{r+K\mathbf{q}^2}$$
(5.37)

und durch Vergleich also wieder eine Einstein-Relation für alle Fourierkomponenten,

$$D(\mathbf{q}) = \hat{\mu}(\mathbf{q})k_B T. \qquad (5.38)$$

AUFGABE: 1. Welche Form hat die Korrelationsfunktion der stochastischen Kraft η im Ortsraum ?

2. Zeige für das Gaußsche Modell noch einmal die Form der rechten Seite von Gl. (5.36) und leite mit Hilfe der Lösung der Bewegungsgleichung Gl. (5.34) die Einsteinrelation $D(\mathbf{q}) = \hat{\mu}(\mathbf{q})k_BT$ her.

5.2.2 Relaxation, Modell A und Modell B

Für die Relaxationsrate $\gamma(\mathbf{q})$ macht man jetzt eine Fallunterscheidung nach dem Verhalten für $\mathbf{q} \to 0$. Die Null-Komponente $\hat{m}(\mathbf{q} = 0, t) = \int d^d x m(\mathbf{x}, t)$ ist nämlich gerade das gesamte räumliche Integral über den Ordnungsparameter, z.B. die Gesamtmagnetisierung. Der Erwartungswert (über die Realisierungen der stochastischen Kraft η) kann je nach Modell eine Erhaltungsgröße sein (Modell B) oder nicht (Modell A) ¹,

$$\frac{\partial \langle \hat{m}(\mathbf{q}=0,t) \rangle}{\partial t} \neq 0, \quad \text{Modell A}$$
(5.39)

$$\frac{\partial \langle \hat{m}(\mathbf{q}=0,t) \rangle}{\partial t} = 0, \quad \text{Modell B, Ordnungsparameter erhalten.}$$
(5.40)

Wegen der Bewegungsgleichung Gl. (5.34) und $\gamma(\mathbf{q}) \equiv \hat{\mu}(\mathbf{q})(r + K\mathbf{q}^2)$ fordern wir dann für das Verhalten von $\hat{\mu}$ in der Nähe von $\mathbf{q} = 0$

$$\hat{\mu}(\mathbf{q} \to 0) = \mu_0, \quad \text{Modell A}$$
 (5.41)

$$\hat{\mu}(\mathbf{q} \to 0) = \mu_0' \mathbf{q}^2$$
, Modell B (5.42)

mit Parametern $\mu_0, \mu'_0 > 0$. Für Modell *B* könnte hier im Prinzip z.B. auch eine Form wie $\hat{\mu}(\mathbf{q} \to 0) = \mu'_0 |\mathbf{q}|$ gelten, aber dann wäre $\hat{\mu}(\mathbf{q})$ nicht mehr analytisch in \mathbf{q} .

5.2.3 Dynamischer kritischer Exponent z

(KARDAR) Mit Hilfe der q-abhängigen Relaxationsrate

$$\gamma(\mathbf{q}) \equiv \frac{1}{\tau(\mathbf{q})} \equiv \hat{\mu}(\mathbf{q})(r + K\mathbf{q}^2)$$
(5.43)

läßt sich jetzt ein weiterer Exponent für das dynamische Verhalten bei Annäherung an den kritischen Punkt, d.h. für Korrelationslänge $\xi \to \infty$, definieren. Im hier betrachteten Gaußschen Modell ist $\xi = \sqrt{K/r}$, und der kritische Punkt liegt bei r = 0.

Für Modell A mit $\gamma(\mathbf{q} \to 0) = \mu_0(r + K\mathbf{q}^2)$ gilt dann bei Annäherung an den kritischen Punkt für Fluktuationen auf Längenskalen $\gg \xi$, dass die Relaxationszeit $\tau(\mathbf{q} \to 0) \to 1/(\mu_0 r)$ wegen $r \to 0$ divergiert. Diese Fluktuationen brauchen also sehr lange, um ins thermische Gleichgewicht zu relaxieren ('critical slowing down'). Etwas genauer schreiben wir in der Nähe des kritischen Punktes

$$\tau(q \ll \xi^{-1}) \propto \left[(\xi^{-2} + q^2) \right]^{-1} \approx \xi^2$$
(5.44)

$$\tau(q \gg \xi^{-1}) \propto \left[(\xi^{-2} + q^2) \right]^{-1} \approx q^{-2}, \quad z = 2, \quad \text{kritischer Exponent } z \ . \ (5.45)$$

Der dynamische kritische Exponent z definiert hier also einen Zusammenhang zwischen einer Zeit- und einer Längenskala.

¹ Diese Klassifikation geht auf den Review-Artikel von P. C. Hohenberg, B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977) zurück.

Für Modell B mit $\gamma(\mathbf{q} \to 0) = \mu'_0 q^2 (r + K \mathbf{q}^2)$ müssen wir dagegen eine Fallunterscheidung je nach Größe von $q \equiv |\mathbf{q}|$ machen;

$$\tau(q \ll \xi^{-1}) \propto [q^2(\xi^{-2} + q^2)]^{-1} \approx [q^2\xi^{-2}]^{-1} = q^{-2}\xi^2, \quad z = 2$$
 (5.46)

$$\tau(q \gg \xi^{-1}) \propto \left[q^2(\xi^{-2} + q^2)\right]^{-1} \approx \left[q^4\right]^{-1} = q^{-4}, \quad z = 4.$$
 (5.47)

Hier ist der Zusammenhang über die q-Abhängigkeit definiert.

Bisher haben wir alles nur für das Gaußschen Modell diskutiert – interessanter und viel schwieriger wird es natürlich, wenn wir über das Gaußsche Modell hinausgehen und dann zur Bestimmung von z z.B. wieder Renormierungsgruppen–Methoden anwenden.

5.2.4 Skalierungsverhalten der Korrelationsfunktion

Wir betrachten hier noch einmal die zeitabhängige Landau–Ginzburg–Gleichung, Gl. (5.33), mit konstanter lokaler Beweglichkeit $\mu(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\mu$ (Modell A) und am kritischen Punkt r = 0 des Gaußmodells u = 0

$$\frac{\partial m(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \mu K \nabla^2 m(\mathbf{x},t) + \eta(\mathbf{x},t).$$
(5.48)

Diese Gleichung hat die Form einer Diffusionsgleichung mit Rauschterm $\eta(\mathbf{x}, t)$. Über das Rauschen gemittelt ist wieder $\langle m(\mathbf{x}, t) \rangle = 0$, und die Korrelationsfunktion folgt aus Gl. (5.37),

$$\langle \hat{m}(\mathbf{q},t)\hat{m}(\mathbf{q}',t)\rangle = (2\pi)^d \delta^d(\mathbf{q}+\mathbf{q}') D_0 \frac{1-e^{-2Dq^2t}}{D\mathbf{q}^2},$$
 (5.49)

wobei wir hier mit $D_0 = \mu k_B T$ die Diffusionskonstante in der Korrelationsfunktion der stochastischen Kraft bezeichnen, um sie von der effektiven Diffusionskonstante $D \equiv K \mu$ aus der zeitabhängigen Landau–Ginzburg–Gleichung zu unterscheiden.

Rücktransformation in den Ortsraum ergibt

$$C(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \equiv \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{q}'\mathbf{x}'} \langle \hat{m}(\mathbf{q}, t)\hat{m}(\mathbf{q}', t) \rangle$$

$$= D_0 \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1 - e^{-2D\mathbf{q}^2 t}}{D\mathbf{q}^2} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}, \quad t \ge 0$$
(5.50)

Die Korrelationsfunktion $C(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t)$ erfüllt

$$\frac{\partial}{\partial t}C(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = 2D_0 \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{-2D\mathbf{q}^2 t} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}, \quad t \ge 0.$$
(5.51)

Durch Umskalieren $\mathbf{k} \equiv D\mathbf{q}^2 t$ finden wir hier

$$\frac{\partial}{\partial t}C(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = 2D_0(Dt)^{-\frac{d}{2}} \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{-2\mathbf{k}^2} e^{i\frac{\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\sqrt{Dt}}} \equiv t^{-\frac{d}{2}} f\left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{t}\right)$$
(5.52)

also eine Skalenform mit Skalenfunktion f und dem dynamischen kritischen Exponenten z = 2, wie wir ihn für Gaußsche Modell–A–Dynamik erwarten. Für $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ gibt es also ein Skalenverhalten in der Zeit

$$C(0,t) \propto t^{-\frac{d}{2}+1},$$
 (5.53)

das gültig ist, solange die **k**–Integration über den ganzen \mathbb{R}^d läuft und nicht abgeschnitten wird.

Wenn andererseits die **q**-Integration durch die Inversen von a (Gitterkonstante) und L (Systemgröße) abgeschnitten wird, haben wir für lange Zeiten $t \to \infty$

$$\lim_{t \to \infty} C(0,t) = 2D_0 \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{D\mathbf{q}^2} \propto \frac{a^{2-d} - L^{2-d}}{d-2}$$
(5.54)

(bzw. $\ln L/a$ für Dimension d = 2). Wir haben hier also $C \propto \text{Länge}^{2-d}$ extrahiert, was zusammen mit dem $C \propto \text{Zeit}^{(2-d)/2}$ wegen des daraus folgenden $\text{Zeit} \propto (\text{Länge})^2$ Sinn macht, was ja gerade einen Diffusionsprozess charakterisiert und natürlich gerade wieder dem dynamischen Exponenten z = 2 entspricht.

5.3 Der Kibble–Zurek–Mechanismus

Wir folgen hier der Einleitung einer neueren Arbeit 2 .

Wir betrachten ein System im Abstand $\epsilon = (T_c - T)/T_c$ von seiner kritischen Temperatur T_c . Die Temperatur wird jetzt langsam so geändert, dass

$$\epsilon(t) = t/\tau_Q$$
, Quench-Zeit τ_Q . (5.55)

Die Quench-rate $1/\tau_Q$ bestimmt hier die Geschwindigkeit $\dot{\epsilon}$ dieser Änderung.

Wenn das 'Quenchen' zu schnell geht, kommt das System oder kommen Teile davon, z.B. bestimmte räumliche Regionen, nicht mehr mit dem Relaxieren (zum jeweils 'gültigen' Gleichgewicht mit der aktuellen Temperatur T) hinterher. Das ist dann bestimmt der Fall, wenn die Relaxationszeit $\tau(\epsilon)$ (die ja nahe T_c rapide anwächst) gleich oder größer als die Zeit wird, in der sich $\epsilon(t)$ merklich (um etwa $\delta \epsilon = \epsilon$ selbst) ändert,

$$\tau(\epsilon(t)) = \delta t, \quad \delta\epsilon(t) = \dot{\epsilon}(t)\delta t \approx \epsilon(t),$$
(5.56)

was auf die Bedingung

$$\tau(\epsilon(\hat{t})) = \frac{\epsilon}{\dot{\epsilon}} = \hat{t}$$
(5.57)

für das Verletzen eines adiabatischen 'Folgens' führt.

Zur Zeit $t = \hat{t}$ ist die Zeit, die noch bis zum Durchlaufen des kritischen Punktes bleibt, gleich der Relaxationszeit.

² J. Dziarmaga, W. H. Zurek, Scientific Reports **4** 5950 (2014).

Nahe T_c verhalten sich die Relaxationszeit $\tau(\epsilon)$ und die Korrelationslänge $\xi(\epsilon)$, wie oben diskutiert, wie

$$\tau(\epsilon) = \tau_0 |\epsilon|^{-\nu z}, \quad \xi(\epsilon) = \xi_0 |\epsilon|^{-\nu} \tag{5.58}$$

mit den kritischen Exponenten ν und z (hier gibt es zunächst keine **q**-Abhängigkeit der Relaxationszeit). Es gilt also zunächst einfach durch Einsetzen

$$\hat{t} = \tau_0 (\tau_Q / \tau_0)^{\frac{\nu z}{1 + \nu z}}, \quad \xi(\epsilon(\hat{t})) = \xi_0 (\tau_Q / \tau_0)^{\frac{\nu}{1 + \nu z}} \equiv \hat{\xi}$$
 (5.59)

Uber den dynamischen kritischen Exponenten z ist der Zeit \hat{t} also, wie zu erwarten war, die Länge $\hat{\xi} \propto \hat{t}^{1/z}$ zugeordnet, die gerade die Korrelationslänge zum Zeitpunkt \hat{t} des 'Ausfrierens' angibt. Auf Teilgebieten mit Volumina $\sim \hat{\xi}^d$ kommt das System mit dem Relaxieren dann nicht mehr hinterher und bleibt gewissermassen 'eingefroren'.

5.4 Equilibrierung eines makroskopischen Quantensystems

In letzter Zeit beschäftigen sich wieder mehr Autoren mit der Frage nach einer mikroskopischen Begründung der thermodynamischen Ensembles. Vereinfacht gesagt geht es dabei z.B. um eine Herleitung eines mikrokanonischen (feste Energie) Gleichgewichts-Zustand (Dichteoperator ρ_{eq}) aus der Schrödingergleichung eines abgeschlossenen Systems. Die zentrale Idee hierbei ist, dass zumindest für makroskopische Quantensysteme 'typischerweise' jeder reine Anfangszustand $|\Psi(0)\rangle$ nach einer gewissen Zeit in einen Gleichgewichts-Zustand *relaxiert*, der für alle praktischen Anwendungen nicht von den üblicherweise in der statistischen Mechanik verwendeten Ensembles unterscheidbar ist.

Diese Art von Fragestellung hat eine lange Tradition, die zumindest bis auf eine Arbeit von J. v. Neumann, 'Beweis des Ergodensatzes und des H-Theorems in der neuen Mechanik', Z. Phys. 57, 30 (1929) zurückgeht, die erst recht spät ins Englische übersetzt wurde und dadurch mehr Aufmerksamkeit auf sich zog ³

Wir folgen hier der Arbeit von Peter Reimann, Phys. Rev. Lett. **101**, 190403 (2008). Ausgangspunkt ist die Dichtematrix $\rho(t)$ und deren unitäre Zeitentwicklung

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^{\dagger}(t), \quad U(t) = e^{-iHt} = \sum_{n} e^{-iE_{n}t} |n\rangle\langle n|$$
(5.60)

eines Quantensystems mit Hamiltonian

$$H = \sum_{n} E_n |n\rangle \langle n| \tag{5.61}$$

mit Eigenwerten und –vektoren. Der Einfachheit halber nehmen wir hier nicht-entartete Eigenwerte E_n an ⁴.

³ Weitere Referenzen sind S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zangh, arXiv:1003.2129v2 (2010), oder S. Goldstein, T. Hara, and H. Tasaki, arXiv:1402.0324v1 (2014).

⁴ Eine ausführlichere Version, in der auch eine mögliche Entartung der Energieniveaus berücksichtigt wird, ist Peter Reimann, New J. Phys. **12**, 055027 (2010).

Das Problem der Equilibrierung wird zunächst aufgeteilt in 1. Präparation eines Anfangszustand $\rho(0)$; 2. Zeitentwicklung unter einem zeitunabhängigen Hamiltonian H; 3. Messung einer Observable A. Ein Zustand ρ heißt exakter Gleichgewichtszustand bezüglich des Hamiltonians H, falls $[\rho, H] = 0$. Ein solcher Zustand entwickelt sich dann zeitlich nicht mehr.

Für einen Anfangszustand $\rho(0)$ mit $[\rho(0), H] \neq 0$ haben wir ein sogenanntes 'Quench-Problem' vorliegen: Bei einem Quench-Problem interessiert man sich für die Zeitentwicklung eines Kets

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_{n} c_n |n\rangle, \qquad (5.62)$$

der zur Zeit t = 0 nicht Eigenzustand eines gegebenen Hamiltonians H ist. Unser Anfangszustand $\rho(0) = |\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)|$ ist also ein reiner Zustand. Die Anfangsbedingung Gl. (5.62) soll so sein, dass sehr viele Energieniveaus besetzt sind (eine extremer gegenteiliger Fall wäre z.B. ein Energie-Eigenzustand $|\Psi(0)\rangle = |n\rangle$, der sich natürlich nur trivial zeitentwickelt und nicht relaxiert.

Der vorliegende Ansatz hier ist insofern 'mikrokanonisch', als dass er von einem geschlossenen Quantensystem mit Hamiltonian H ausgeht und nicht von vorneherein von einer Aufspaltung in 'System' und 'Bad'.⁵

5.4.1 Zeitmittelung

Als ersten Schritt (vgl. auch TASAKI 2010) führen wir in Analogie zur klassischen Ergodenhypothese ('Scharmittel = Zeitmittel') eine Zeitmittelung

$$\overline{\rho} \equiv \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \rho(t) = \sum_{nm} \langle m | \rho(0) | n \rangle | m \rangle \langle n | \overline{e^{-i(E_m - E_n)t}}$$
(5.63)

durch. Diese sollte auf einen stationären Dichteoperator ρ_{eq} führen, der dann (unter weiteren Voraussetzungen) ein mikrokanonisches Ensemble beschreibt.

Ohne Entartung berechnen wir

$$\overline{\rho} = \sum_{n} \langle n | \rho(0) | n \rangle \langle n | = \sum_{n} p_{n} | n \rangle \langle n | \equiv \rho_{\text{eq}}, \qquad (5.64)$$

denn für $n \neq m$ gilt $E_n \neq E_m$ und die Zeitmittelung gibt ein Kronecker- $\delta_{n,m}$ wegen ⁶

$$\overline{e^{iat}} = \delta_{a,0}.\tag{5.65}$$

Bei Entartung muss man zusätzlich voraussetzen, dass es keine Kohärenzen des anfänglichen Dichteoperators $\rho(0)$ innerhalb der Unterräume zu fester Energie E_n gibt, d.h. $\langle m | \rho(0) | n \rangle =$

⁵ Noah Linden, Sandu Popescu, Anthony J. Short, und Andreas Winter (PHYSICAL REVIEW E **79**, 061103, 2009) gehen von einer Aufspaltung des Gesamtsystems in System und Bad aus. Sie benutzen die unitäre Zeitentwicklung der Wellenfunktion des Gesamtsystems und machen ebenfalls die Annahme, dass es keine Entartung von Übergangsfrequenzen gibt.

⁶ Das gilt wegen $\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{iat} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{iaT} \left(e^{iaT} - 1 \right) = 0$ für $a \neq 0$.

0 für $n \neq m$ mit $E_n = E_m$. Das ist aber keine Einschränkung, da man die Basis $|n\rangle$ immer so wählen kann, dass $\rho(0)$ in Unterräumen zu fester Energie E_n diagonal ist, denn die Projektion $P_{E_n}\rho(0)P_{E_n}$ auf diese Unterräume vertauscht mit H, und deshalb existiert dort ein gemeinsames System von Eigenvektoren.

Für Mittelwerte von Observablen A gilt also

$$\overline{A} \equiv \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \operatorname{Tr} \rho(t) A = \operatorname{Tr} \rho_{\text{eq}} A.$$
(5.66)

Die Frage ist jetzt, ob das sinnvolle Mittelwerte sind, oder ob Fluktuationen um diese Mittelwerte so stark sind, dass die Mittelwerte selbst letztlich bedeutungslos werden.

5.4.2 Fluktuationen

Die Fluktuationen (mit dem Anfangszustand Gl. (5.62)) berechnen wir nun aus

$$\sigma_A^2 \equiv \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \left(\text{Tr}\rho(t)A - \overline{A} \right)^2$$

$$(5.67)$$

$$= \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \left(\sum_{nm} c_n c_m^* e^{-i(E_n - E_m)t} \langle m|A|n \rangle - \sum_n |c_n|^2 \langle n|A|n \rangle \right)^2 . (5.68)$$

Aus dem Quadrat ergeben sich drei Terme

- Der gemischte Term $-2\overline{A} \times \overline{A}$.
- Das Quadrat des letzten Terms \overline{A}^2 .

• Der Term
$$\sum_{nmn'm'} c_n c_m^* c_{n'} c_{m'}^* \overline{e^{-i(E_n - E_m + E_{n'} - E_{m'})t}} \langle m|A|n \rangle \langle m'|A|n' \rangle.$$

Im Zeitmittel des Phasenfaktors hat man nun zwei Fälle, die immer Eins ergeben;

$$\overline{e^{-i(E_n - E_m + E_{n'} - E_{m'})t}} = 1, \quad , \quad n = m \text{ und } n' = m' \rightsquigarrow \text{Term } \overline{A}^2.$$
(5.69)

$$\overline{e^{-i(E_n - E_m + E_{n'} - E_{m'})t}} = 1, \quad , \quad n = m' \text{ und } m = n', n \neq m \text{ und } n' \neq m', \tag{5.70}$$

denn in diesen Fällen sind die Exponenten immer Null und die Zeitmittelung ist trivial.

Jetzt kommt die wichtige Annahme (mit der man überhaupt weiterkommt), dass tatsächlich *nur* für die zwei obigen Fälle die Exponenten Null sind und alle anderen Kombinationen der n, m, n', m' immer von Null verschieden Energiedifferenzen im Exponenten ergeben, so dass die Zeitmittelung den Phasenfaktor verschwinden lässt und diese Terme in der Summe $\sum_{nmn'm'}$ überhaupt nicht beitragen. Diese Annahme bedeutet, dass es keine weitere Entartung von Energiedifferenzen (Bohrschen Übergangsfrequenzen) $E_n - E_m, E_{n'} - E_{m'}$ außer den zwei oben genannten Fällen im System gibt. Man argumentiert, dass das normalerweise für ein makroskopisches Quantensystem (mit seinem komplizierten Spektrum) erfüllt sein sollte. Von den drei obigen Termen bleibt dann insgesamt nur noch der letzte Term Gl. (5.70) übrig,

$$\sigma_A^2 = \sum_{nm; n \neq m} |c_n|^2 |c_m|^2 \langle m|A|n \rangle \langle n|A|m \rangle \le \sum_{nm} |c_n|^2 |c_m|^2 |\langle m|A|n \rangle|^2.$$
(5.71)

Hier ist im letzten Term die Einschränkung $n \neq m$ weggelassen, wodurch wegen der Positivität der Summanden eine größere Summe entsteht.

Wegen

$$\rho_{\rm eq} = \sum_{n} |c_n|^2 |n\rangle \langle n| \tag{5.72}$$

können wir die rechte Seite von Gl. (5.71) auch umschreiben,

$$\sigma_A^2 \le \sum_n |c_n|^2 \langle n | A \rho_{\rm eq} A | n \rangle = \operatorname{Tr}(A \rho_{\rm eq} A \rho_{\rm eq} A).$$
(5.73)

Hier ist eine Auswertung der Spur in der Eigenbasis $\{|\lambda\rangle\}$ der Observablen A sinnvoll, d.h.

$$\sigma_{A}^{2} \leq \sum_{\lambda} \langle \lambda | A \rho_{\rm eq} A \rho_{\rm eq} | \lambda \rangle = \sum_{\lambda \lambda'} \lambda \langle \lambda | \rho_{\rm eq} | \lambda' \rangle \lambda' \langle \lambda' | \rho_{\rm eq} | \lambda \rangle$$

$$\leq \lambda_{\rm max}^{2} \sum_{\lambda \lambda'} \langle \lambda | \rho_{\rm eq} | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \rho_{\rm eq} | \lambda \rangle = \lambda_{\rm max}^{2} \operatorname{Tr} \rho_{\rm eq}^{2}.$$
(5.74)

Hierbei ist λ_{max} der größte positive Eigenwert der Observablen A, während $\text{Tr}\rho_{\text{eq}}^2$ von A unabhängig ist und als Reinheit ('purity') des Zustands ρ_{eq} bezeichnet wird (SKRIPT THERMODYNAMIK). Nach dem Messpostulat ist λ_{max} also der größte mögliche Messwert, der bei einer projektiven von-Neumann-Messung von A auftreten kann.

5.4.3 Auflösungsgrenze bei Messungen

Der Zustand $\rho(t)$ kann als Ersatz für einen 'echten' Gleichgewichtszustand ρ_{eq} dienen, wenn mit ihm berechnete Erwartungswerte

$$\langle A \rangle_t \equiv \text{Tr}\rho(t)A$$
 (5.75)

praktisch ununterscheidbar von den mit ρ_{eq} berechneten Erwartungswerten Tr $\rho_{eq}A$ werden. Um das zu quantifizieren, betrachten wir $\langle A \rangle_t$ in Gl. (5.75) als stochastischen Prozess, d.h. eine Zufallsvariable $a = \langle A \rangle_t$ parametrisiert durch die Zeit t. Die Wahrscheinlichkeit für eine Abweichung eines mit $\rho(t)$ berechneten Wertes $\langle A \rangle_t$ vom Mittelwert Tr $\rho_{eq}A$ kann mit Hilfe der Varianz σ_A^2 und einer a priori angenommenen, plausiblen Auflösungsgrenze δA der Messapparatur ausgedrückt werden. Hierzu benötigt man

Satz 3 (Chebyshev–Ungleichung). Sei x eine Zufallsvariable mit Mittelwert μ und Varianz $\langle (x-\mu)^2 \rangle = \sigma^2$. Sei die Zahl $\kappa > 0$ fest vorgegeben. Dann gilt folgende Ungleichung für die Wahrscheinlichkeit

$$Prob\left(|x-\mu| > \kappa\right) < \left(\frac{\sigma}{\kappa}\right)^2.$$
(5.76)

Wenn wir das auf unser Problem anwenden, erhalten wir

$$\operatorname{Prob}\left(\left|\operatorname{Tr}\rho(t)A - \operatorname{Tr}\rho_{\mathrm{eq}}A\right| \ge \delta A\right) \le \left(\frac{\sigma_A}{\delta A}\right)^2 \tag{5.77}$$

für alle Zeiten $t \ge 0$. Wenn die rechte Seite sehr klein ist, bedeutet das also, dass die Wahrscheinlichkeit für eine noch auflösbare Abweichung vom Gleichgewichtswert sehr klein ist.

Die Auflösungsgrenze δA ist wie folgt definiert: wir bezeichnen für eine 'realistische' Messgröße A (Kap. 4 in Reimann 2010) mit Δ_A die Breite des Intervalls der überhaupt möglichen Messwerte (Eigenwerte a) von A, d.h. die Differenz $\Delta_A \equiv a_{\max} - a_{\min}$ zwischen dem größten und dem kleinsten Eigenwert. Die Auflösungsgrenze δA bei der Messung von A ist dann definiert über eine sehr kleine Zahl $10^{-N_A} \ll 1$ (N_A entspricht etwa der Zahl der Nachkommastellen im Dezimalsystem bei der Angabe eines Wertes von A in physikalischen Einheiten), so dass

$$\delta A \equiv \frac{\Delta_A}{10^{N_A}}.\tag{5.78}$$

Hierbei wird der Prozess der Messung, das Messgerät und damit das Zustandekommen von δA nicht weiter modelliert. Die rechte Seite in Gl. (5.77) läßt sich als $(\lambda_{\text{max}}/\delta A)^2 \text{Tr} \rho_{\text{eq}}^2$ (mit der Reinheit $\text{Tr} \rho_{\text{eq}}^2$) ausdrücken. Letztere ist typischerweise für System mit sehr vielen Freiheitsgraden extrem klein.

Bisher haben wir also mit plausiblen Annahmen eine effektive Equilibrierung insofern erreicht, dass Messungen typischerweise immer (unabhängig von der Zeit t) auf konstante Erwartungswerte führen. Was wir hier nicht bekommen, ist die tatsächliche Relaxationszeit: auf hinreichend kurzen Zeitskalen ist das System ja noch nahe am Anfangszustand und kann nicht gut durch ρ_{eq} beschrieben werden. Dieses Problem der Zeitskala für die Relaxation ist momentan ebenfalls Gegenstand der aktuellen Forschung (z.B. Sheldon Goldstein, Takashi Hara, and Hal Tasaki, arXiv:1402.0324v1 (2014)).

5.4.4 Zusammenhang mit mikrokanonischem Ensemble

Bisher haben wir nur Equilibrierung, aber keine Thermalisierung bzw. die für unsere abgeschlossene Situation nötige Relaxation in einen mikrokanonischen Zustand. Ein Argument ist nun, dass die obige Herleitung bereits vollständig ist und der Zustand ρ_{eq} bereits die gesamte Thermodynamik beschreibt.

Es kommt aber auch ein weiteres qualitatives Argumentation zur Präparation des Anfangszustands $|\Psi(0)\rangle = \sum_{n} c_{n} |n\rangle$, Gl. (5.62), ins Spiel: die Präparation erfolgt typischerweise so, dass es exponentiell viele $c_{n} \neq 0$ sind und die Energien

$$E_n \in [E - \Delta E/2, E + \Delta E/2] \equiv I_E$$
, Energieschale (5.79)

in einer 'Energieschale' der Breite ΔE um eine feste Energie E liegen (mikrokanonische Situation). Der Ausdruck $\operatorname{Tr} \rho_{\text{eq}} A = \sum_n |c_n|^2 \langle n|A|n \rangle$ soll dann unabhängig von der genauen Wahl der c_n sein. Es ist klar, dass diese Unabhängigkeit von den Details des Zustands $|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ überhaupt wieder nur im makroskopischen Limes gelten kann.

6. FEYNMAN-VERNON INFLUENCE FUNCTIONAL THEORIES

6.1 Introduction, Motivation

This is a technique to solve the Liouville-von-Neumann Equation,

$$\frac{d}{dt}\chi(t) = -i[H,\chi(t)], \rightsquigarrow \chi(t) = e^{-iHt}\chi(t=0)e^{iHt}, \qquad (6.1)$$

for the time-dependent density matrix $\rho(t)$ of system-bath Hamiltonians

$$H \equiv H_S + H_B + H_{SB}.\tag{6.2}$$

It is mainly useful for cases where the system Hamiltonian H_S referees to a single (or a few) degrees of freedom, coupled via H_{SB} to a bath H_B of many degrees of freedom. The technique is based on **double path integrals**. The original reference is R. P. Feynman, F. L. Vernon, Ann. Phys. (N. Y.) **24**, 118 (1963).

One of the applications of influence functional theories is the systematic derivation of a semiclassical dynamics (Fokker-Planck equations, ...) from an exact quantummechanical theory:



6.2 Single Path Integrals

We assume a time-independent Hamiltonian for a particle of mass M in a one-dimensional potential V(x) (the generalisation to larger than one dimension is easy),

$$H \equiv T + V, \quad T \equiv \frac{p^2}{2M}.$$
(6.3)

The solution of the Schrödinger equation can be written as

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi(0)\rangle, \quad \langle x|\Psi(t)\rangle = \int dx' G(x,t;x',t'=0)\langle x'|\Psi(0)\rangle, \quad t>0$$
 (6.4)

with the help of the **propagator**

$$G(x,t;x') \equiv G(x,t;x',t'=0) \equiv \langle x|e^{-iHt}|x'\rangle.$$
(6.5)

We now use the Trotter product formula

$$e^{-\lambda(T+V)} = \left(e^{-\frac{\lambda}{N}(T+V)}\right)^N = \lim_{N \to \infty} \left(e^{-\frac{\lambda}{N}T}e^{-\frac{\lambda}{N}V}\right)^N \tag{6.6}$$

with $\lambda = it$ ($\hbar = 1$) and write (inserting the identity N - 1 times)

$$G(x,t;x') = \lim_{N \to \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \prod_{j=0}^{N-1} \langle x_{j+1} | e^{-\frac{\lambda}{N}T} e^{-\frac{\lambda}{N}V} | x_j \rangle, \quad x_N \equiv x, x_0 \equiv x'$$

$$= \lim_{N \to \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \prod_{j=0}^{N-1} \langle x_{j+1} | e^{-\frac{\lambda}{N}T} | x_j \rangle e^{-\frac{\lambda}{N}V(x_j)}. \quad (6.7)$$

Now use (cf. p 1.15, 1.17),

$$\int \frac{dp}{(2\pi)} |p\rangle \langle p| = 1, \quad \langle x|p\rangle = e^{ipx} \rightsquigarrow$$
$$\langle x|e^{-\frac{\lambda}{N}T}|y\rangle = \langle x|e^{-\frac{\lambda}{2MN}p^2}|y\rangle$$
$$\int \frac{dp}{2\pi} \langle x|p\rangle e^{-\frac{\lambda}{2MN}p^2} \langle p|y\rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{-\frac{\lambda}{2MN}p^2 + ip(x-y)} = \sqrt{\frac{MN}{2\pi\lambda}} e^{-MN(x-y)^2/2\lambda}, (6.8)$$

where we analytically continued the formula for Gaussian integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2 + bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}, \quad \text{Re } a > 0,$$
(6.9)

 $a \rightarrow ia + \eta, \eta > 0$, cf. Fresnel integrals and the book by H. Kleinert, 'Path Integrals' 2nd edition, World Scientific (Singapore, 1995).

We now introduce $\varepsilon = t/N = \lambda/iN$ and have

$$G(x,t;x') = \lim_{N \to \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{MN}{2\pi\lambda}\right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=0}^{N-1} \exp\left[-\frac{MN(x_j - x_{j+1})^2}{2\lambda} - \frac{\lambda V(x_j)}{N}\right]$$
$$= \lim_{N \to \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{M}{2\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left[i\varepsilon \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{M}{2} \frac{(x_j - x_{j+1})^2}{\varepsilon^2} - V(x_j)\right]\right]$$
$$\equiv \int_{x'}^x \mathcal{D}x e^{i\int_0^t dt' \mathcal{L}(x,\dot{x})}, \quad \mathcal{L}(x,\dot{x}) = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 - V(x). \tag{6.10}$$

Here, we have defined the **Lagrange Function** \mathcal{L} for the **path** $x(t'), 0 \leq t' \leq t, x(0) \equiv x', x(t) \equiv x$ with start point x and end point x' in configuration space. The **Feynman path integral measure** $\mathcal{D}x$ is a symbolic way of writing the limit $N \to \infty$,

$$\mathcal{D}x = \lim_{N \to \infty} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left(\frac{M}{2\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}.$$
(6.11)

- When calculating the path integral explicitly, one always has to go back to the finite N version and then take $N \to \infty$.
- The path integral represents an integration over *all* paths of the particle starting at x and ending at x', not only the ones allowed by the Euler-Lagrange equations of classical mechanics. Each path is weighted with the factor $\exp(iS_{cl})$, where

$$S_{\rm cl} \equiv \int_0^t dt' \frac{1}{2} M \dot{x}(t')^2 - V(x(t')) \tag{6.12}$$

is the classical action integral of the individual path x(t'). We therefore can write

$$G(x,t;x') = \int_{x'}^{x} \mathcal{D}x \exp(iS_{\rm cl}).$$
(6.13)

Note, however, that this is only a shorthand notation for the discretised version in the $N \to \infty$ limit.

6.3 Double Path Integrals

Now let us come back to our density operator for our system-bath Hamiltonian,

$$H \equiv H_S + H_B + H_{SB}, \chi(t) = e^{-iHt}\chi(t=0)e^{iHt}.$$
(6.14)

For the moment, let us assume that the system has one degree of freedom q and the bath the degree of freedom x (the generalisation to many bath degrees of freedom x_i is straightforward). We then use a representation of $\chi(t)$ in spatial coordinates,

$$\langle x, q | \chi(t) | q', x' \rangle = \int dq_0 dq'_0 dx_0 dx'_0 \langle x, q | e^{-iHt} | q_0, x_0 \rangle \langle x_0 q_0 | \chi(t=0) | q'_0, x'_0 \rangle$$

$$\times \langle x'_0 q'_0 | e^{iHt} | q', x' \rangle.$$

$$(6.15)$$

We trace out the bath degree of freedoms to obtain an effective density matrix

$$\rho(t) \equiv \text{Tr}_{\text{B}}\chi(t) \tag{6.16}$$

of the system,

$$\langle q|\rho(t)|q'\rangle = \int dq_0 dq'_0 dx_0 dx'_0 dx \langle x, q|e^{-iHt}|q_0, x_0\rangle \langle x_0 q_0|\chi(t=0)|q'_0, x'_0\rangle$$

$$\times \quad \langle x'_0 q'_0|e^{iHt}|q', x\rangle.$$

$$(6.17)$$

Now we realise that the Hamiltonian $H \equiv H_S + H_B + H_{SB}$ induces a classical action $S_{\text{total}} \equiv S_S[q] + S_B[x] + S_{SB}[xq]$, where in the following for notational simplicity we omit indices at the three S. We use the path integral representation for the propagator matrix elements,

$$\begin{aligned} \langle q|\rho(t)|q'\rangle &= \int dq_0 dq'_0 dx_0 dx'_0 dx \int_{q_0}^q \mathcal{D}q \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int_{q'_0}^{q'} \mathcal{D}^*q' \int_{x'_0}^{x'=x} \mathcal{D}^*x' \\ &\times \exp\left[i\left(S[q] + S[x] + S[xq]\right) - i\left(S[q'] + S[x'] + S[x'q']\right)\right] \\ &\times \langle x_0 q_0|\chi(t=0)|q'_0, x'_0\rangle \\ &= \int dq_0 dq'_0 \int_{q_0}^q \mathcal{D}q \int_{q'_0}^{q'} \mathcal{D}^*q' \exp\left[i\left(S[q] - S[q']\right)\right] \\ &\times \int dx_0 dx'_0 dx \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int_{x'_0}^x \mathcal{D}^*x' \exp\left[i\left(S[x] + S[xq]\right) - i\left(S[x'] + S[x'q']\right)\right] \\ &\times \langle x_0 q_0|\chi(t=0)|q'_0, x'_0\rangle \\ &= \left[\text{assume } \chi(t=0) = \rho(0) \otimes \rho_B\right] \\ &= \int dq_0 dq'_0 \langle q_0|\rho(0)|q'_0\rangle \int_{q_0}^q \mathcal{D}q \int_{q'_0}^{q'} \mathcal{D}^*q' \exp\left[i\left(S[q] - S[q']\right)\right] \frac{\mathcal{F}[q(t'), q'(t')]}{\mathcal{F}[q(t'), q'(t')]} \\ &\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] &\equiv \int dx_0 dx'_0 dx \langle x_0|\rho_B|x'_0\rangle \\ &\times \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int_{x'_0}^x \mathcal{D}^*x' \exp\left[i\left(S[x] + S[xq]\right) - i\left(S[x'] + S[x'q']\right)\right] \end{aligned}$$

- In the original Feynman-Vernon method, one assumes a factorising initial condition $\chi(t=0) = \rho(0) \otimes \rho_B$, although that can be generalised to non-factorising initial density matrices $\chi(t=0)$, cf. for example H. Grabert, P. Schramm, G. L. Ingold, Phys. Rep. **168**, 115 (1988), or the book by Weiss.
- The functional $\mathcal{F}[q(t'), q'(t')]$ is called **influence functional**. It describes the effect of the bath on the time-evolution of the system density matrix.
- For zero system-bath coupling $H_{SB} = 0$, $\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] = 1$

6.4 The Influence Functional

Let us assume that we can write

$$H_{SB} = H_{SB}[q] = f(\hat{q})\hat{X}$$
 (6.18)

with some given bath operator \hat{X} and some given function $f(\hat{q})$ of the system coordinate \hat{q} . The influence functional can then be written as

$$\mathcal{F}[q(t'),q'(t')] \equiv \int dx_0 dx'_0 dx \langle x_0 | \rho_B | x'_0 \rangle$$

$$\times \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \exp\left[i\left(S[x] + S[xq]\right)\right] \int_{x'_0}^x \mathcal{D}^* x' \exp\left[-i\left(S[x'] + S[x'q']\right)\right]$$

$$= \int dx_0 dx'_0 dx \langle x_0 | \rho_B | x'_0 \rangle \langle x | U_B[q] x_0 \rangle \left[\langle x | U_B[q'] x'_0 \rangle\right]^*$$

$$= \operatorname{Tr}_B\left(\rho_B U_B^{\dagger}[q'] U_B[q]\right), \qquad (6.19)$$

where $U_B[q]$ is the unitary time-evolution operator for the time-dependent Hamiltonian $H_B + H_{SB}[q]$ with a given $q(t'), 0 \le t' \le t$. Note that q(t') and q'(t') are independent paths, they enter as 'external' parameters into the influence functional which then in the final expression for $\langle q | \rho(t) | q' \rangle$ is integrated over all paths q(t') and q'(t'). This form is useful to recognise general properties of $\mathcal{F}[q(t'), q'(t')]$,

• $q(t') = q'(t') \rightsquigarrow \mathcal{F}[q(t'), q'(t')] = 1.$

•
$$|\mathcal{F}[q(t'), q'(t')]| \le 1.$$

The

Operator Form of Influence Functional

$$\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] \equiv \operatorname{Tr}_{B}\left(\rho_{B}U_{B}^{\dagger}[q']U_{B}[q]\right),$$
(6.20)

is particularly useful for discussing the coupling to other baths (spin-baths, Fermi baths etc.)

6.5 Influence Functional for Coupling to Harmonic Oscillators

We start with the coupling of the system to a single harmonic oscillator,

$$H_B + H_{SB}[q] \equiv H_B(t) \equiv \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2 x^2 + g(t)x,$$
(6.21)

where without loss of generality we set f[q(t)] = g(t).
6.5.1 Time-evolution operator $U_B[q] \equiv U_B(t)$

This is given by the solution of the Schrödinger equation,

$$i\frac{\partial}{\partial t}U_B(t) = H_B(t)U_B(t), \quad U_B(0) = 1,$$
(6.22)

the formal solution of which is

$$U_B(t) = T e^{-i \int_0^t dt' H_B(t')}$$
(6.23)

with the time-ordering operator T. Now, $U_B(t)$ can't be directly calculated from Eq. (6.23) because the $H_B(t')$ do not commute with each other at different times ¹. One solution is to calculate $U_B(t)$ by direct evaluation of the path integral which is tedious but can be done. Here, we show an alternative solution: introduce the interaction picture and write

$$H_B(t) = H_0 + g(t)x \equiv H_0 + V(t)$$

$$U_B(t) = e^{-iH_0t}\tilde{U}(t), \quad i\partial_t\tilde{U}(t) = \tilde{V}(t)\tilde{U}(t)$$

$$\tilde{V}(t) = e^{iH_0t}V(t)e^{-iH_0t} = g(t)\left(\hat{x}\cos\Omega t + \frac{\hat{p}}{M\Omega}\sin\Omega t\right).$$
(6.24)

We solve for $\tilde{U}(t)$ by making the general *ansatz*

$$\tilde{U}(t) = e^{-iA(t)}e^{-iB(t)\hat{x}}e^{-iC(t)\hat{p}}$$
(6.25)

with functions A(t) etc to be determined by taking the time-derivative of $\tilde{U}(t)$. This yields

$$\begin{split} i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{U}(t) &= \dot{A}(t)\tilde{U}(t) + \hat{x}\dot{B}(t)\tilde{U}(t) + \dot{C}(t)e^{-iA(t)}\underline{e^{-iB(t)\hat{x}}}\hat{p}e^{-iC(t)\hat{p}} \\ &= \dot{A}(t)\tilde{U}(t) + \hat{x}\dot{B}(t)\tilde{U}(t) + \dot{C}(t)e^{-iA(t)}\left(\underline{\hat{p}e^{-iB(t)\hat{x}} + \left[e^{-iB(t)\hat{x}}, \hat{p}\right]}\right)e^{-iC(t)\hat{p}} \\ &= use\left[e^{-i\alpha x}, p\right] = i\partial_{x}e^{-i\alpha x} = \alpha e^{-i\alpha x} \\ &= \left(\dot{A}(t) + \hat{x}\dot{B}(t) + \hat{p}\dot{C}(t) + B(t)\dot{C}(t)\right)\tilde{U}(t) \equiv \tilde{V}(t)\tilde{U}(t). \end{split}$$
(6.26)

Therefore, comparing with the expression for $\tilde{V}(t)$ yields

$$B(t) = \int_0^t dt' g(t') \cos \Omega t', \quad C(t) = \frac{1}{M\Omega} \int_0^t dt' g(t') \sin \Omega t'$$

$$A(t) = -\frac{1}{M\Omega} \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds g(t') g(s) \cos \Omega s \sin \Omega t'$$
(6.27)

¹ This is a dangerous source of mistakes, cf. J. H. Reina, L. Quiroga, and N. F. Johnson, '*Decoherence of quantum registers*', Phys. Rev. A **65**, 032326 (2002)

and therefore,

$$\langle x|U_B(t)|x'\rangle = \langle x|e^{-iH_0t}e^{-iA(t)}e^{-iB(t)\hat{x}}e^{-iC(t)\hat{p}}|x'\rangle = e^{-iA(t)}\langle x|e^{-iH_0t}e^{-iB(t)\hat{x}}|x'+C(t)\rangle = e^{-iA(t)}\langle x|e^{-iH_0t}|x'+C(t)\rangle e^{-iB(t)[x'+C(t)]}$$
(6.28)

In order to get explicit results here, we now need the propagator matrix elements for the harmonic oscillator,

$$\langle x|e^{-iH_0t}|x'\rangle = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi i \sin \Omega t}} \exp\left\{\frac{iM\Omega}{2\sin \Omega t} \left[\left(x^2 + x'^2\right)\cos \Omega t - 2xx'\right]\right\}.$$
(6.29)

These again can either be obtained by direct evaluation of the single path integral for the harmonic oscillator or (somewhat simpler) by using the stationary eigenstates. The matrix element for the driven harmonic oscillator, $\langle x|U_B(t)|x'\rangle$, can then after some transformations (straightforward algebra with trig functions) be written as

$$\langle x|U_B(t)|x'\rangle = \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi i \sin \Omega t}} \exp\left\{iS(x,t;x')\right\}$$

$$S(x,t;x') \equiv \frac{iM\Omega}{2\sin \Omega t} \left[\left(x^2 + x'^2\right)\cos\Omega t - 2xx'\right]$$

$$- \frac{2x}{M\Omega} \int_0^t dt'g(t')\sin\Omega t' - \frac{2x'}{M\Omega} \int_0^t dt'g(t')\sin\Omega(t-t')$$

$$- \frac{2}{M^2\Omega^2} \int_0^t \int_0^{t'} dt'dsg(t')g(s)\sin\Omega(t-t')\sin\Omega s \right].$$

$$(6.30)$$

This coincides with the result given in L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Wiley (1981).

6.5.2 Influence Phase

The influence phase can be obtained directly from its definition, Eq. (6.19),

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[q(t'),q'(t')] &\equiv \operatorname{Tr}_{B}\left(\rho_{B}U_{B}^{\dagger}[q']U_{B}[q]\right) = \operatorname{Tr}_{B}\left(\rho_{B}\tilde{U}^{\dagger}[q']e^{iH_{0}t}e^{-iH_{0}t}\tilde{U}[q]\right) \\ &= \operatorname{Tr}_{B}\left(\rho_{B}e^{iC'\hat{p}}e^{iB'\hat{x}}e^{iA'}e^{-iA}e^{-iB\hat{x}}e^{-iC\hat{p}}\right) \\ &= e^{i(A'-A)}\int dx \langle x|\rho_{B}|e^{iC'\hat{p}}e^{i(B'-B)\hat{x}}e^{-iC\hat{p}}|x\rangle \\ &= e^{i(A'-A)}\int dx \langle x|\rho_{B}|x+C-C'\rangle e^{i(B'-B)(x+C)}, \end{aligned}$$

where for a moment we abbreviated A, A' etc. for the integrals Eq. (6.27) with $g(t') \equiv f(q(t'))$ in the undashed and $g'(t') \equiv f(q'(t'))$ in the dashed (not the derivative) quanti-

ties. We now assume a *thermal equilibrium* for the density operator ρ_B ,

$$\rho_B = \frac{e^{-\beta H_0}}{Z}, \quad Z = \text{Tr}e^{-\beta H_0} = \frac{1}{2\sinh\beta\Omega/2}$$

$$\langle x|\rho_B|x'\rangle = \frac{1}{Z}\sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi\sinh\Omega\beta}}\exp\left\{\frac{-M\Omega}{2\sinh\beta\Omega}\left[\left(x^2 + x'^2\right)\cosh\beta\Omega - 2xx'\right]\right\},$$
(6.31)

where we used the matrix elements of the propagator $\langle x|e^{-iH_0t}|x'\rangle$ for $it = \beta$ (Wick rotation of the time t). Doing the Gaussian integral yields

$$\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] = e^{i(A'-A)} \int dx \langle x | \rho_B | x + C - C' \rangle e^{i(B'-B)(x+C)}$$

$$= e^{i(A'-A)} \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{M\Omega}{2\pi \sinh \Omega\beta}} \int dx e^{i(B'-B)(x+C)}$$

$$\times \exp\left\{-\frac{M\Omega}{2\sinh \beta\Omega} \left[\left(x^2 + (x+C-C')^2\right) \cosh \beta\Omega - 2x(x+C-C') \right] \right\}$$

$$= \left[\text{use } \tanh \frac{x}{2} = \frac{\cosh x - 1}{\sinh x}, \quad \coth x - \frac{1}{2} \tanh \frac{x}{2} = \frac{1}{2} \coth \frac{x}{2} \right]$$

$$= \exp\left\{ i(A'-A) + \frac{i}{2}(B'-B)(C+C') \right\}$$

$$\times \exp\left\{-\frac{1}{4M\Omega} \coth \frac{\beta\omega}{2} \left[(B'-B)^2 + M^2\Omega^2(C-C')^2 \right] \right\}. \quad (6.32)$$

the last step now is to re-insert the definitions of A, B, C, A', B', C'. The resulting long expression

$$\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] \tag{6.33}$$

$$= \exp\left\{-\frac{1}{4M\Omega} \coth\frac{\beta\omega}{2} \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t} ds (g_{t'}' - g_{t'})(g_{s}' - g_{s}) \cos\Omega(t' - s)\right\}$$

$$\times \exp\left\{-\frac{i}{M\Omega} \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} ds (g_{t'}'g_{s}' - g_{t'}g_{s}) \cos\Omega s \sin\Omega t'\right\}$$

$$\times \exp\left\{\frac{i}{2M\Omega} \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t} ds (g_{t'}'g_{s}' - g_{t'}g_{s}) \cos\Omega t' \sin\Omega s\right\}$$

$$\times \exp\left\{\frac{i}{2M\Omega} \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t} ds (g_{t'}g_{s} - g_{t'}g_{s}) \cos\Omega t' \sin\Omega s\right\} \tag{6.34}$$

can be further simplified with $\sin \alpha \cos \beta = \frac{1}{2} [\sin(\alpha - \beta) + \sin(\alpha + \beta)]$ and carefully considering the limits of the integrals and the symmetry of the integrands. Re-installing furthermore $g_{t'} \equiv g(t') \equiv f[q_{t'}]$ (we write the time-arguments as an index to avoid bulky expressions with too many brackets), the result can be written in a compact form, the Feynman-Vernon Influence Functional for the coupling of a single particle to a single harmonic oscillator in thermal equilibrium,

$$H = H_{S}[q] + H_{B}[x] + H_{SB}[xq] = H_{S}[q] + \frac{p^{2}}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^{2}x^{2} + f[q]x$$

$$\langle q|\rho(t)|q'\rangle = \int dq_{0}dq'_{0}\langle q_{0}|\rho(0)|q'_{0}\rangle \int_{q_{0}}^{q} \mathcal{D}q \int_{q'_{0}}^{q'} \mathcal{D}^{*}q' \exp\left[i\left(S[q] - S[q']\right)\right] \frac{\mathcal{F}[q_{t'}, q'_{t'}]}{\mathcal{F}[q_{t'}, q'_{t'}]}$$

$$\mathcal{F}[q_{t'}, q'_{t'}] = \exp\left\{-\Phi[q_{t'}, q'_{t'}]\right\} \quad \text{Influence Functional}$$

$$\Phi[q_{t'}, q'_{t'}] = \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} ds \left\{f[q_{t'}] - f[q'_{t'}]\right\} \left\{L(t' - s)f[q_{s}] - L^{*}(t' - s)f[q'_{s}]\right\}$$

$$L(\tau) = \frac{1}{2M\Omega} \left(\coth\frac{\beta\Omega}{2}\cos\Omega\tau - i\sin\Omega\tau\right). \quad (6.35)$$

6.5.3 Linear Response, Fluctuation-Dissipation Theorem for L(t)

We first check that

$$L(t) = \langle x(t)x \rangle_0, \tag{6.36}$$

the (van-Hove) position correlation function of the harmonic oscillator with co-ordinate x in thermal equilibrium: write

$$x = \sqrt{\frac{1}{2M\Omega}} \left(a + a^{\dagger} \right), \quad x(t) = \sqrt{\frac{1}{2M\Omega}} \left(ae^{-i\Omega t} + a^{\dagger}e^{i\Omega t} \right)$$
$$L(t) = \langle x(t)x \rangle_{0} = \frac{1}{2M\Omega} \langle aa^{\dagger}e^{-i\Omega t} + a^{\dagger}ae^{i\Omega t} \rangle = \frac{1}{2M\Omega} \left\{ (1 + n_{B})e^{-i\Omega t} + n_{B}e^{i\Omega t} \right\}$$
$$= \frac{1}{2M\Omega} \left\{ (1 + 2n_{B})\cos\Omega t - i\sin\Omega t \right\} = \frac{1}{2M\Omega} \left\{ \coth\frac{\beta\Omega}{2}\cos\Omega t - i\sin\Omega t \right\}.$$
(37)

where we again have used the relation

$$1 + 2n_B = 1 + \frac{2}{e^{\beta\Omega} - 1} = \frac{e^{\beta\Omega} + 1}{e^{\beta\Omega} - 1} = \coth\frac{\beta\Omega}{2}.$$
 (6.38)

Now let us have another look at this function. Consider the Hamiltonian

$$H_B[x] + H_{SB}[xq] \equiv H(t) = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2 x^2 + f(t)x,$$
(6.39)

where we consider the function $f[q_t] = f(t)$ for a fixed path q_t as an external classical force acting on the oscillator. The density matrix $\rho_B(t)$ of the oscillator in the interaction picture fulfills, cf Eq.(??),

$$\tilde{\rho}_{B}(t) = \rho_{0} - i \int_{0}^{t} dt' f(t') [\tilde{x}(t'), \tilde{\rho}_{B}(t')] \qquad (6.40)$$

$$\approx \rho_{0} - i \int_{0}^{t} dt' f(t') [\tilde{x}(t'), \rho_{0}] \quad \text{1st order,}$$

where $\rho_0 = \rho_B(t = 0)$ is assumed to be the thermal equilibrium density matrix. The expectation value of the position is then

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &\equiv \operatorname{Tr} \rho_B(t) x = \operatorname{Tr} \tilde{\rho}_B(t) \tilde{x}(t) \\ &= \langle x \rangle_0 - i \int_0^t dt' f(t') \operatorname{Tr} [\tilde{x}(t'), \rho_0] \tilde{x}(t) = \langle x \rangle_0 - i \int_0^t dt' f(t') \operatorname{Tr} \rho_0 [\tilde{x}(t), \tilde{x}(t')] \\ &= \langle x \rangle_0 - i \int_0^t dt' f(t') \langle [\tilde{x}(t), \tilde{x}(t')] \rangle_0, \quad \text{1st order.} \end{aligned}$$

We check that

$$\langle [\tilde{x}(t), \tilde{x}(t')] \rangle_0 = \langle [\tilde{x}(t-t'), \tilde{x}(0)] \rangle_0 \tag{6.41}$$

(definition of ρ_0 !) and define the **linear susceptibility**

$$\chi_{xx}(t-t') \equiv i\theta(t-t') \langle [\tilde{x}(t-t'), \tilde{x}(0)] \rangle_0, \qquad (6.42)$$

so that we can write

$$\langle x \rangle_t = \langle x \rangle_0 - i \int_0^t dt' \chi_{xx}(t - t') f(t').$$
(6.43)

The theta function in $\chi_{xx}(t-t')$ guarantees causality: the response of x at time t is determined by the system at *earlier* times $t' \leq t$ only.

Define additional functions and their symmetric and antisymmetric (in time) linear combinations,

$$C^{+}(t) \equiv \langle \tilde{x}(t)x \rangle_{0}, \quad C^{-}(t) \equiv \langle \tilde{x}(-t)x \rangle_{0} = \langle x\tilde{x}(t) \rangle_{0}$$

$$C^{\pm}(t) \equiv S(t) \pm iA(t) \quad (6.44)$$

$$S(t) = S(-t) = \frac{1}{2} \langle \tilde{x}(t)x + x\tilde{x}(t) \rangle_{0}, \quad A(t) = -A(-t) = \frac{1}{2i} \langle \tilde{x}(t)x - x\tilde{x}(t) \rangle_{0}.$$

We thus have

$$\chi_{xx}(t) = -2\theta(t)A(t) \tag{6.45}$$

We define the Fourier transforms,

$$\hat{C}^{\pm}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt C^{\pm}(t) e^{i\omega t}, \quad \hat{S}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt S(t) e^{i\omega t}, \quad \hat{A}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt A(t) e^{i\omega t}$$
$$\hat{\chi}(\omega) \equiv \int_{0}^{\infty} dt \chi(t) e^{i\omega t} \quad (6.46)$$

and use

$$\operatorname{Tr}(e^{-\beta H_B} x \tilde{x}(t)) = \operatorname{Tr}(e^{-\beta H_B} x e^{\beta H_B} e^{-\beta H_B} \tilde{x}(t)) = \operatorname{Tr}(\tilde{x}(i\beta) e^{-\beta H_B} \tilde{x}(t))$$

$$= \operatorname{Tr}(e^{-\beta H_B} \tilde{x}(t) \tilde{x}(i\beta)) = \operatorname{Tr}(e^{-\beta H_B} \tilde{x}(t-i\beta)x)$$

$$\rightsquigarrow \quad C^-(t) = C^+(t-i\beta), \qquad (6.47)$$

and therefore in the Fourier transform

$$C^{-}(\omega) = C^{+}(\omega)e^{-\beta\omega}$$
 (detailed balance relation). (6.48)

We now define real and imaginary part of the Fourier transform of the susceptibility,

$$\hat{\chi}_{xx}(\omega) \equiv \hat{\chi}'_{xx}(\omega) + i\hat{\chi}''_{xx}(\omega).$$
(6.49)

Then,

$$\hat{\chi}''(\omega) = \operatorname{Im} \int_{0}^{\infty} dt \chi(t) e^{i\omega t} = -2 \operatorname{Im} \int_{0}^{\infty} dt A(t) e^{i\omega t} = -2 \frac{1}{2i} \int_{0}^{\infty} dt \left(A(t) e^{i\omega t} - A(t) e^{-i\omega t} \right) \\ = i \left(\int_{0}^{\infty} dt A(t) e^{i\omega t} - \int_{-\infty}^{0} dt A(-t) e^{i\omega t} \right) = [A(t) = -A(-t)] = i \int_{-\infty}^{\infty} dt A(t) e^{i\omega t} \\ = i \hat{A}(\omega) = i \frac{1}{2i} \left(\hat{C}^{+}(\omega) - \hat{C}^{-}(\omega) \right) = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\beta \omega} \right) \hat{C}^{+}(\omega)$$
(6.50)

The relation

$$\hat{\chi}''(\omega) = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\beta\omega} \right) \hat{C}^+(\omega) \tag{6.51}$$

is called **Fluctuation-Dissipation Theorem (FDT)** (Callen, Welton 1951) and can be re-written, using

$$\hat{S}(\omega) = \frac{1}{2}(\hat{C}^{+}(\omega) + \hat{C}^{-}(\omega)) = \frac{1}{2}\left(1 + e^{-\beta\omega}\right)\hat{C}^{+}(\omega),$$
(6.52)

leading to

$$\hat{S}(\omega) = \hat{\chi}''(\omega) \coth \frac{\beta \omega}{2}.$$
(6.53)

Example- harmonic oscillator: we have

$$\chi(t) = i\theta(t)\langle [x(t), x] \rangle_0 = \frac{i\theta(t)}{2M\Omega} \left(e^{-i\Omega t} - e^{i\Omega t} \right)$$

$$\rightsquigarrow \hat{\chi}_{xx}(\omega) = \operatorname{Im} \frac{i}{2M\Omega} \int_0^\infty dt \left(e^{-i\Omega t} - e^{i\Omega t} \right) e^{i\omega t}$$

$$= \frac{1}{2M\Omega} \int_0^\infty dt \left\{ \cos(\omega - \Omega)t - \cos(\omega + \Omega)t \right\}$$

$$= \frac{1}{2M\Omega} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dt \left\{ \cos(\omega - \Omega)t - \cos(\omega + \Omega)t \right\}, \quad (6.54)$$

therefore

$$\hat{\chi}_{xx}(\omega) = \frac{1}{2M\Omega} \frac{2\pi}{2} \left\{ \delta(\omega - \Omega) - \delta(\omega + \Omega) \right\}.$$
(6.55)

On the other hand,

$$C(t) \equiv L(t) = \langle \tilde{x}(t)x \rangle_0 = \frac{1}{2M\Omega} \left\{ \coth \frac{\beta\Omega}{2} \cos \Omega t - i \sin \Omega t \right\}$$

$$\Rightarrow S(t) = \frac{1}{2M\Omega} \coth \frac{\beta\Omega}{2} \cos \Omega t$$

$$\Rightarrow S(\omega) = \frac{1}{2M\Omega} \pi \left\{ \delta(\omega + \Omega) + \delta(\omega - \Omega) \right\} \coth \frac{\beta\Omega}{2}$$

$$= \frac{1}{2M\Omega} \pi \left\{ -\delta(\omega + \Omega) + \delta(\omega - \Omega) \right\} \coth \frac{\beta\omega}{2} = \hat{\chi}_{xx}(\omega) \coth \frac{\beta\omega}{2}, \quad (6.56)$$

which is consistent with the FDT.

6.6 Applications: Linear Coupling, Damped Harmonic Oscillator

Our result for the influence phase can immediately be generalised to a single particle, coupled to a system of N > 1 harmonic oscillators in thermal equilibrium,

$$H = H_{S}[q] + H_{B}[x] + H_{SB}[xq] = H_{S}[q] + \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{p_{\alpha}^{2}}{2M_{\alpha}} + \frac{1}{2}M_{\alpha}\Omega_{\alpha}x^{2} + f_{\alpha}[q]x_{\alpha}$$

$$\mathcal{F}[q_{t'}, q_{t'}'] = \exp\left\{-\Phi[q_{t'}, q_{t'}']\right\} \quad \text{Influence Functional}$$

$$\Phi[q_{t'}, q_{t'}'] = \sum_{\alpha=1}^{N} \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} ds \left\{f_{\alpha}[q_{t'}] - f_{\alpha}[q_{t'}']\right\} \left\{S_{\alpha}(t'-s)f_{\alpha}[q_{s}] - S_{\alpha}^{*}(t'-s)f_{\alpha}[q_{s}']\right\}$$

$$S_{\alpha}(\tau) = \frac{1}{2M_{\alpha}\Omega_{\alpha}} \left(\coth\frac{\beta\Omega_{\alpha}}{2}\cos\Omega_{\alpha}\tau - i\sin\Omega_{\alpha}\tau\right). \quad (6.57)$$

6.6.1 Linear Coupling

In many applications, one assumes (often for simplicity) a *linear coupling* to the bath,

$$H_{B}[x] + H_{SB}[xq] = \sum_{\alpha=1}^{N} \left[\frac{p_{\alpha}^{2}}{2M_{\alpha}} + \frac{1}{2}M_{\alpha}\Omega_{\alpha}^{2}\left(x_{\alpha} - \frac{c_{\alpha}}{M_{\alpha}\Omega_{\alpha}^{2}}q\right)^{2} \right]$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{N} \left[\frac{p_{\alpha}^{2}}{2M_{\alpha}} + \frac{1}{2}M_{\alpha}\Omega_{\alpha}^{2}x_{\alpha}^{2} - c_{\alpha}qx_{\alpha} + \frac{1}{2}\frac{c_{\alpha}^{2}}{M_{\alpha}\Omega_{\alpha}^{2}}q^{2} \right]$$

$$\mathcal{F}[q_{t'}, q_{t'}'] = \exp\left\{-\Phi[q_{t'}, q_{t'}']\right\} \quad \text{Influence Functional}$$

$$\Phi[q_{t'}, q_{t'}'] = \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} ds \left\{q_{t'} - q_{t'}'\right\} \left\{L(t'-s)q_{s} - L^{*}(t'-s)q_{s}'\right\}$$

$$+ i\frac{\mu}{2}\int_{0}^{t} dt' \left\{q_{t'}^{2} - (q_{t'}')^{2}\right\}$$
(6.58)

Here, the kernel L(t) and the spectral density $J(\omega)$ are

$$L(\tau) \equiv \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left(\coth \frac{\beta \omega}{2} \cos \omega \tau - i \sin \omega \tau \right)$$
$$J(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha=1}^N \frac{c_\alpha^2}{M_\alpha \Omega_\alpha} \delta(\omega - \Omega_\alpha).$$
(6.59)

Note that in this form, an additional term appears in H_{SB} as a potential

$$V_{\text{counter}}(q) \equiv \frac{1}{2}\mu q^2, \quad \mu \equiv \frac{1}{2}\sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{M_{\alpha}\Omega_{\alpha}^2} = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} d\omega.$$
(6.60)

Since the action S appears as $\exp(iS[q])$ in the path integral for q and $\exp(-iS[q])$ in the path integral for q', we could absorb the counter term into the influence phase as

$$\exp(i\frac{\mu}{2}\int_0^t dt' \left\{q_{t'}^2 - (q_{t'}')^2\right\}).$$

Note that the entire information on the coupling to the bath is now contained in the spectral density $J(\omega)$, which we have defined following the notation of Weiss, 'Quantum Dissipative Systems'.

6.6.2 Propagator for Damped Harmonic Oscillator

One now has to face the tedious task to (exactly) evaluate the double path integral, which can be done because it is Gaussian. Reference: H. Grabert, P. Schramm, and G.-L. Ingold, Phys. Rep. **168**, 115 (1988).

Comparison to Master Equation Approach: R. Karrlein, H. Grabert, Phys. Rev. E 55, 153 (1997).

6.7 Another Look at Influence Functionals for General Baths

(This sub-section is partly due to private communications from W. Zwerger). Feynman and Vernon realised that the coupling of a system S to any bath B can be mapped onto the coupling to an equivalent oscillator bath, if the coupling is weak and second order perturbation theory can be applied: let us have another look at the operator form of the influence functional, Eq. (6.20),

$$\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] \equiv \operatorname{Tr}_{B}\left(\rho_{B}U_{B}^{\dagger}[q']U_{B}[q]\right) H_{B}(t) = H_{0} + V(t), \quad H_{B}'(t) = H_{0} + V'(t), \quad (6.61)$$

where $U_B[q]$ is the time-evolution operator for $H_B(t)$ and $U_B^{\dagger}[q']$ the (backwards in time) evolution operator for $H'_B(t)$. Here, $H_B(t)$ and $H'_B(t)$ refer to different paths q and q'.

Example: For a Fermi bath, we could have

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k c_k^{\dagger} c_k, \quad V(t) \equiv V[q_t] = \sum_{kk'} M_{kk'} \exp(i(k-k')q_t) c_{k'}^{\dagger} c_k.$$
(6.62)

where c_k^\dagger creates a Fermion with quantum number k.

We again introduce the interaction picture and write

$$U_B[q] = e^{-iH_0 t} \left\{ 1 - i \int_0^t dt' \tilde{V}(t') - \int_0^t \int_0^{t'} dt' ds \tilde{V}(t') \tilde{V}(s) + \dots \right\}$$
$$U_B^{\dagger}[q'] = \left\{ 1 + i \int_0^t dt' \tilde{V}'(t') - \int_0^t \int_0^{t'} dt' ds \tilde{V}'(s) \tilde{V}'(t') + \dots \right\} e^{iH_0 t}$$
(6.63)

The product of the two time-evolution operators therefore becomes

$$\begin{aligned} U_{B}^{\dagger}[q']U_{B}[q] &= 1 - i \int_{0}^{t} dt' \left\{ \tilde{V}'(t') - \tilde{V}(t') \right\} + \int_{0}^{t} dt' \tilde{V}'(t') \int_{0}^{t} ds \tilde{V}(s) \\ &- \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(s) \tilde{V}'(t') + \tilde{V}(t') \tilde{V}(s) \right\} + \dots \\ &= 1 - i \int_{0}^{t} dt' \left\{ \tilde{V}'(t') - \tilde{V}(t') \right\} + \frac{1}{2} \int_{0}^{t} \int_{0}^{t} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(t') \tilde{V}(s) + \tilde{V}'(s) \tilde{V}(t') \right\} \\ &- \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(s) \tilde{V}'(t') + \tilde{V}(t') \tilde{V}(s) \right\} + \dots \\ &= 1 - i \int_{0}^{t} dt' \left\{ \tilde{V}'(t') - \tilde{V}(t') \right\} + \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(t') \tilde{V}(s) + \tilde{V}'(s) \tilde{V}(t') \right\} \\ &- \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(s) \tilde{V}'(t') + \tilde{V}(t') \tilde{V}(s) \right\} + \dots \\ &= 1 - i \int_{0}^{t} dt' \left\{ \tilde{V}'(t') - \tilde{V}(t') \right\} + \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(t') - \tilde{V}(t') \right\} \\ &- \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(s) \tilde{V}'(t') - \tilde{V}(t') \right\} + \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(t') - \tilde{V}(t') \right\} \\ &- \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ \tilde{V}'(s) \left[\tilde{V}'(t') - \tilde{V}(t') \right] \right\} + \dots \end{aligned}$$

$$(6.64)$$

In order to be a little bit more definite, a useful parametrisation of the interaction operators might be

$$\hat{V}(t) \equiv \sum_{\alpha\beta} g_{\alpha\beta}(t) \hat{X}_{\alpha\beta}, \quad \hat{V}'(t) \equiv \sum_{\alpha\beta} g'_{\alpha\beta}(t) \hat{X}_{\alpha\beta}, \quad (6.65)$$

with bath operators $\hat{X}_{\alpha\beta}$. Note that this comprises the cases considered so far (harmonic

oscillator, Fermi bath). Taking the trace over ρ_B , we obtain

$$\mathcal{F}[q(t'),q'(t')] \equiv \operatorname{Tr}_{B}\left(\rho_{B}U_{B}^{\dagger}[q']U_{B}[q]\right) \equiv \langle U_{B}^{\dagger}[q']U_{B}[q]\rangle_{0}$$

$$= 1 - i\sum_{\alpha\beta} \int_{0}^{t} dt' \left\{ g_{\alpha\beta}'(t') - g_{\alpha\beta}(t') \right\} \langle \tilde{X}_{\alpha\beta}(t')\rangle_{0}$$

$$+ \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} dt' ds \left\{ g_{\alpha\beta}'(t') - g_{\alpha\beta}(t') \right\} \left[g_{\gamma\delta}(s) \langle \tilde{X}_{\alpha\beta}(t') \tilde{X}_{\gamma\delta}(s) \rangle_{0} - g_{\gamma\delta}'(s) \langle \tilde{X}_{\gamma\delta}(s) \tilde{X}_{\alpha\beta}(t') \rangle_{0} \right] + \dots \qquad (6.66)$$

Introducing the correlation tensor

$$L_{\alpha\beta\gamma\delta}(t',s) \equiv \langle \tilde{X}_{\alpha\beta}(t')\tilde{X}_{\gamma\delta}(s)\rangle_0, \qquad (6.67)$$

this can be written as

$$\mathcal{F}[q(t'), q'(t')] = 1 - i \sum_{\alpha\beta} \int_0^t dt' \left\{ g'_{\alpha\beta}(t') - g_{\alpha\beta}(t') \right\} \langle \tilde{X}_{\alpha\beta}(t') \rangle_0$$

+
$$\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int_0^t \int_0^{t'} dt' ds \left\{ g'_{\alpha\beta}(t') - g_{\alpha\beta}(t') \right\} \left[g_{\gamma\delta}(s) L_{\alpha\beta\gamma\delta}(t', s) - g'_{\gamma\delta}(s) L_{\gamma\delta\alpha\beta}(s, t') \right]$$

+ ... (6.68)

6.7.1 'Re-Exponentiation'

So far this expression for the influence functional is very general, but it is only to second order in the system-bath interaction! In principle, one should write down the entire Dyson series for $U_B^{\dagger}[q']$ and $U_B[q]$ and sum up all the terms of the resulting expression in order to obtain the final result for the influence functional. Clearly, this is in general not possible, and it is even not guaranteed that such an expression would be convergent and mathematically meaningful.

For simplicity, let us assume that the linear term vanishes,

$$\langle \tilde{X}_{\alpha\beta}(t') \rangle_0 \equiv 0. \tag{6.69}$$

For example, this is fullfilled for coupling to a linear harmonic oscillator, $\hat{X}_{\alpha\beta} \equiv \delta_{\alpha\beta}\hat{x}$ with \hat{x} the oscillator coordinate.

At least some contributions to the infinite series for $\mathcal{F}[q(t'), q'(t')]$ can be summed up in closed form: this is done by 're-exponentiation'. In fact, up to second order in the system-bath interaction, we can write (summarising all our definitions so far)

$$\hat{V}[q_t] \equiv \sum_{\alpha\beta} g_{\alpha\beta}[q_t] \hat{X}_{\alpha\beta}, \quad L_{\alpha\beta\gamma\delta}(t',s) \equiv \langle \tilde{X}_{\alpha\beta}(t')\tilde{X}_{\gamma\delta}(s) \rangle_0$$

$$\mathcal{F}^{\text{pert}}[q(t'),q'(t')] = \exp\{-\Phi^{\text{pert}}[q(t'),q'(t')]\},$$

$$\Phi^{\text{pert}}[q(t'),q'(t')] = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \int_0^t \int_0^{t'} dt' ds \{g_{\alpha\beta}[q_{t'}] - g_{\alpha\beta}[q'_{t'}]\}$$

$$\times \left[g_{\gamma\delta}[q_s] L_{\alpha\beta\gamma\delta}(t',s) - g_{\gamma\delta}[q'_s] L_{\gamma\delta\alpha\beta}(s,t')\right] \quad (6.70)$$

by simply expanding the exponential. The 're-exponentiation' automatically sums up an infinite number of terms. Such 'exponentiation' schemes are known, e.g., from cluster expansions of the statistical operator $e^{-\beta \hat{H}}$. The important observation here is that for the harmonic oscillator case, this re-exponentiation becomes exact: with $\hat{V} = f[q]\hat{x}$ and $\hat{V'} = f[q']\hat{x}$, we recognise

$$\Phi[q(t'), q'(t')] = \int_0^t \int_0^{t'} dt' ds \left\{ f[q_{t'}] - f[q'_{t'}] \right\} \left\{ L(t', s) f[q_s] - L(s, t') f[q'_s] \right\}, (6.71)$$

$$L(t', s) = \langle x(t') x(s) \rangle_0 = \langle x(t' - s) x \rangle_0 = L(t' - s)$$

$$L(s, t') = \langle x(s) x(t') \rangle_0 = \langle x(t') x(s) \rangle_0^* = L^*(t' - s), \qquad (6.72)$$

and therefore by comparison with Eq. (6.35) we find that both expressions co-incide.

6.8 'Semiclassical' Limit for Damped Single Particle Motion

References: A. Schmid, J. Low Temp. Phys. 49, 609 (1982); W. Zwerger, Phys. Rev. B 35, 4737 (1987); N. Janssen and W. Zwerger, Phys. Rev. B 52, 9406 (1995); U. Weiss, 'Quantum Dissipative Systems' (2nd ed.), World Scientific (Singapore) (1999), ch. 5.5.

Let us assume a single particle in a potential V(q),

$$H_S = \frac{p^2}{2m} + V(q).$$
(6.73)

We consider the reduced density matrix $\rho(t)$ of the system S,

$$\rho(x, y, t) \equiv \langle x + y/2 | \rho(t) | x - y/2 \rangle, \tag{6.74}$$

where we set

$$q = x + y/2, \quad q' = x - y/2; \quad x = \frac{1}{2} (q + q'), \quad y = q - q',$$
 (6.75)

thus introducing the 'center-of-mass' coordinate x and the relative coordinate y. Note that the **Wigner distribution function** f(x, p, t) is obtained from the density matrix as a Fourier transform with respect to the relativ co-ordinate y,

$$f(x, p, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \rho(x, y, t) e^{-ipy}.$$
 (6.76)

Correspondingly, in the double path integral we integrate over center-of-mass-coordinate and relative-coordinate paths,

$$x_t = \frac{1}{2} \left(q_t + q'_t \right), \quad y_t = q_t - q'_t \tag{6.77}$$

The Jacobian of the corresponding discretised variable transformation is one whence one can write

$$\rho(x, y, t) = \int dx_0 dy_0 \rho_0(x_0, y_0) J(x, y, t; x_0, y_0)
J(x, y, t; x_0, y_0) = \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int_{y_0}^y \mathcal{D}y \exp\left[i \int_0^t dt' \left(M \dot{x}_{t'} \dot{y}_{t'} - V(x + y/2) + V(x - y/2)\right)\right]
\times \exp\left\{-\Phi[x_{t'}, y_{t'}]\right\}$$
(6.78)

6.8.1 Expansion of the Influence Phase

In order to derive a semiclassical limit from the double path integral, the central idea is to expand the influence phase in powers of the paths $y_{t'}$. The $y_{t'}$ -paths describe 'off-diagonal excursions' from the diagonal paths $x_{t'}$ in the time-evolution of $\rho(t)$. We write

$$\mathcal{F}[x_{t'}, y_{t'}] = \exp \{-\Phi[x_{t'}, y_{t'}]\}$$
 Influence Functional

$$-\Phi[x_{t'}, y_{t'}] = -\sum_{\alpha=1}^{N} \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} ds \{f_{\alpha}[x_{t'} + y_{t'}/2] - f_{\alpha}[x_{t'} - y_{t'}/2]\}$$

$$\times \{S_{\alpha}(t' - s)f_{\alpha}[x_{s} + y_{s}/2] - S_{\alpha}^{*}(t' - s)f_{\alpha}[x_{s} - y_{s}/2]\}$$

$$= -\sum_{\alpha=1}^{N} \int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} ds f_{\alpha}'[x_{t'}]y_{t'}$$

$$\times \{\operatorname{Re} S_{\alpha}(t' - s)f_{\alpha}'[x_{s}]y_{s} + 2i\operatorname{Im} S_{\alpha}(t' - s)f_{\alpha}[x_{s}]\} + O[y_{s}]^{3}. (6.79)$$

In the semiclassical approximation, we thus can write the influence functional as

$$\mathcal{F}_{\rm sc}[x_{t'}, y_{t'}] \equiv \exp\left\{-\Phi[x_{t'}, y_{t'}]\right\} = \exp\left\{i\phi_1 - \phi_2\right\}$$

$$i\phi_1 \equiv -i\int_0^t dt' \int_0^{t'} ds\varphi_1[x_s]\underline{y_{t'}}, \quad \varphi_1[x_s] \equiv \sum_{\alpha=1}^N 2\operatorname{Im} S_\alpha(t'-s)f'_\alpha[x_{t'}]f_\alpha[x_s]$$

$$\phi_2 \equiv \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds\varphi_2[x_s]\underline{y_{t'}y_s}, \quad \varphi_2[x_s] \equiv \sum_{\alpha=1}^N \operatorname{Re} S_\alpha(t'-s)f'_\alpha[x_{t'}]f'_\alpha[x_s].$$
(6.80)

Exercise: Check that for the linear model (coupling linear in q), Eq.(6.58), the influence phase becomes

$$\Phi[x_{t'}, y_{t'}] = \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds y_{t'} \left\{ \operatorname{Re} L(t'-s)y_s + 2i \operatorname{Im} L(t'-s)x_s \right\} + i\mu \int_0^t dt' x_{t'} y_{t'}.$$
(6.81)

For the linear model, the semiclassical expansion of the influence phase is therefore exact.

In a similar way, we expand the potential $V(x \pm y/2)$ in the action in powers of the off-diagonal path y, thus arriving at

$$\rho_{\rm sc}(x,y,t) = \int dx_0 dy_0 \rho_0(x_0,y_0) J_{\rm sc}(x,y,t;x_0,y_0)$$

$$J_{\rm sc}(x,y,t;x_0,y_0) = \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int_{y_0}^y \mathcal{D}y \exp\left[i \int_0^t dt' \left(M\dot{x}_{t'}\dot{y}_{t'} - V'(x_{t'})y_{t'}\right)\right]$$

$$\times \exp\left\{-i \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \varphi_1[x_s] y_{t'} - \int_0^t dt' \int_0^{t'} ds \varphi_2[x_s] y_{t'} y_s\right\}.$$
(6.82)

The first step now is to perform an integration by parts to transform the term $M\dot{x}_{t'}\dot{y}_{t'}$, and to re-arrange

$$J_{sc}(x, y, t; x_{0}, y_{0}) = \int_{x_{0}}^{x} \mathcal{D}x \int_{y_{0}}^{y} \mathcal{D}y \exp\left[iM(\dot{x}_{t}y - \dot{x}_{0}y_{0})\right]$$

$$\times \exp\left[-i\int_{0}^{t} dt'y_{t'} \left\{M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_{B}[x_{s}, t']\right\} - \int_{0}^{t} dt'\int_{0}^{t'} ds\varphi_{2}[x_{s}]y_{t'}y_{s}\right]$$

$$F_{B}[x_{s}, t'] \equiv \int_{0}^{t'} ds\varphi_{1}[x_{s}] = \int_{0}^{t'} ds\sum_{\alpha=1}^{N} 2\operatorname{Im} S_{\alpha}(t' - s)f'_{\alpha}[x_{t'}]f_{\alpha}[x_{s}]$$

$$= -\sum_{\alpha=1}^{N} \int_{0}^{t'} ds\frac{\sin\Omega_{\alpha}(t' - s)}{M_{\alpha}\Omega_{\alpha}}f'_{\alpha}[x_{t'}]f_{\alpha}[x_{s}]. \qquad (6.83)$$

This is an interesting expression: the term in the brackets {} looks likely to lead to a classical equation of motion,

$$M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_B[x_s, t'] = 0, (6.84)$$

where $-V'(x_{t'})$ is the force due to the potential V(x), and $F_B[x_s, t']$ is a retarded, position-dependent deterministic friction force due to the bath. In addition, however, there is the term quadratic in y containing the function

$$\varphi_{2}[x_{s}] \equiv \sum_{\alpha=1}^{N} \operatorname{Re} S_{\alpha}(t'-s) f_{\alpha}'[x_{t'}] f_{\alpha}'[x_{s}]$$
$$= \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{1}{2M_{\alpha}\Omega_{\alpha}} \operatorname{coth} \frac{\beta\Omega_{\alpha}}{2} \cos\Omega_{\alpha}(t'-s) f_{\alpha}'[x_{t'}] f_{\alpha}'[x_{s}], \qquad (6.85)$$

which is the only place where the bath temperature $T = 1/\beta$ enters.

6.8.2 Completing the Square

This is a useful trick when dealing with functional integrals. We start from the identity for a real symmetric, positive definite $n \times n$ matrix A,

$$e^{-\frac{1}{2}\mathbf{y}A\mathbf{y}} = [2\pi \det A]^{-n/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 ... dx_n e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x}A^{-1}\mathbf{x} + i\mathbf{y}\mathbf{x}}$$
(6.86)

Exercise: Prove this identity. Hint: use the standard formula for Gaussian integrals and a linear transformation that diagonalises A.

We now obtain

$$\exp\left[-\frac{1}{2}\int_{0}^{t}\int_{0}^{t}dt'dsA(t',s)y_{t'}y_{s}\right] = \lim_{N \to \infty}\exp\left[-\frac{\varepsilon^{2}}{2}\sum_{j,k=0}^{N-1}A_{jk}y_{j}y_{k}\right]$$
$$= \lim_{N \to \infty}\left[2\pi \det A\right]^{-N/2}\int d\xi_{0}...d\xi_{N-1}\exp\left[-\frac{\varepsilon^{2}}{2}\sum_{j,k=0}^{N-1}\xi_{j}\frac{A_{jk}^{-1}}{\varepsilon^{2}}\xi_{k} + i\varepsilon\sum_{j=0}^{N-1}y_{j}\xi_{j}\right]$$
$$= \int \mathcal{D}\xi\exp\left[-\int_{0}^{t}\int_{0}^{t}dt'ds\xi_{t'}A^{-1}(t',s)\xi_{s} + i\int_{0}^{t}dt'y_{t'}\xi_{t'}\right]$$
(6.87)
$$\mathcal{D}\xi \equiv \lim_{N \to \infty}\left[2\pi \det A\right]^{-N/2}d\xi_{0}...d\xi_{N-1}$$
$$A(t',s) = \varphi_{2}[x](t',s), \quad \text{cf. Eq. (6.85).}$$

Here, we have used the fact that the discrete inverse of an operator needs to be divided by ε^2 ,

$$A^{-1}(t',s) \leftrightarrow \frac{1}{\varepsilon^2} A_{jk}^{-1}.$$
(6.88)

This can be derived by considering the discrete equivalent of the delta function and leads to the following translation table between continuous and discrete:

$$f(x) = \int dx' \delta(x - x') f(x'), \quad f_m = \sum_m \delta_{mn} f_n = \varepsilon \sum_m \frac{\delta_{mn}}{\varepsilon} f_n$$

$$\rightarrow \quad \delta(x - x') \leftrightarrow \frac{\delta_{mn}}{\varepsilon}$$

$$\int dx' A^{-1}(x, x') A(x', x'') = \quad \delta(x - x'), \quad \varepsilon \sum_{m'} \frac{A^{-1}_{mm'}}{\varepsilon^2} A_{m'm''} = \frac{\delta_{mm''}}{\varepsilon}$$

$$\rightarrow \quad A^{-1}(x, x') \leftrightarrow \frac{1}{\varepsilon^2} A^{-1}_{mm'}.$$
(6.89)

Now using the fact that φ_2 is symmetric in t' and s, we have

$$\int_{0}^{t} dt' \int_{0}^{t'} ds \varphi_2[x_s] y_{t'} y_s = \frac{1}{2} \int_{0}^{t} dt \int_{0}^{t} ds \varphi_2[x_s] y_{t'} y_s \tag{6.90}$$

and therefore

$$J_{\rm sc}(x, y, t; x_0, y_0) = \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int_{y_0}^y \mathcal{D}y e^{iM(\dot{x}_t y - \dot{x}_0 y_0)}$$

$$\times \exp\left[-i \int_0^t dt' y_{t'} \left\{M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_B[x_s, t']\right\} - \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' ds \varphi_2[x_s] y_{t'} y_s\right]$$

$$= \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int_{y_0}^y \mathcal{D}y e^{iM(\dot{x}_t y - \dot{x}_0 y_0)} \int \mathcal{D}\xi[x] \exp\left[-\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' ds \xi_{t'} \varphi_2[x_s]^{-1} \xi_s\right]$$

$$\times \exp\left[-i \int_0^t dt' y_{t'} \left\{M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_B[x_s, t'] - \xi_{t'}\right\}\right].$$
(6.91)

Here we have explicitly indicated the dependence of the measure $\mathcal{D}\xi[x]$ on the paths x_s , which enters through the determinant of the operator $\varphi_2[x_s]$. The pathintegral over $\mathcal{D}y$ is now very easy: we find ($\varepsilon = t/N$)

$$\int_{y_0}^{y} \mathcal{D}y \exp\left[-i \int_0^t dt' y_{t'} b_{t'}\right] = \lim_{N \to \infty} \int dy_1 \dots dy_{N-1} \left(\frac{M}{2\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left[-i\varepsilon \sum_{j=0}^{N-1} y_j b_j\right]$$
$$= \lim_{N \to \infty} \left(\frac{M}{2\pi i\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \frac{2\pi \delta(b_0)}{\varepsilon} \dots \frac{2\pi \delta(b_{N-1})}{\varepsilon} e^{-i\varepsilon y_0 b_0} \equiv \Delta(y_{t'} - b_{t'}), \tag{6.92}$$

Here, Δ indicates the product of delta functions that fixes the $y_{t'}$ path to the $b_{t'}$ path, and for $\varepsilon \to 0$ the $e^{-i\varepsilon y_0 b_0}$ becomes irrelevant. Inserting yields

$$J_{\rm sc}(x, y, t; x_0, y_0) = e^{iM(\dot{x}_t y - \dot{x}_0 y_0)} \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int \mathcal{D}\xi[x] \exp\left[-\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' ds \xi_{t'} \varphi_2[x_s]^{-1} \xi_s\right] \\ \times \quad \Delta(M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_B[x_s, t'] - \xi_{t'}).$$
(6.93)

6.8.3 Wigner Distribution in 'Semi-classical' Limit

Considering now the definition of the Wigner distribution function,

$$f_{\rm sc}(x,p,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} \rho(x,y,t) e^{-ipy} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} e^{-ipy} \int dx_0 dy_0 \rho_0(x_0,y_0) J_{\rm sc}(x,y,t;x_0,y_0)$$

$$= \int \frac{dy}{2\pi} dx_0 dy_0 \rho_0(x_0,y_0) e^{-ipy} e^{iM(\dot{x}_t y - \dot{x}_0 y_0)} \int_{x_0}^{x} \mathcal{D}x \int \mathcal{D}\xi[x] e^{-\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' ds \xi_{t'} \varphi_2[x_s]^{-1} \xi_s}$$

$$\times \quad \Delta(M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_B[x_s,t'] - \xi_{t'})$$

$$= \int dx_0 f_0(x_0,p_0 = M\dot{x}_0) \delta(p - M\dot{x}) \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int \mathcal{D}\xi[x] e^{-\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' ds \xi_{t'} \varphi_2[x_s]^{-1} \xi_s}$$

$$\times \quad \Delta(M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_B[x_s,t'] - \xi_{t'}). \tag{6.94}$$

Here, the y-integral generated $\delta(p - M\dot{x})$, and the y₀-integral transformed the initial condition $\rho_0(x_0, y_0)$ into its Wigner transform $f_0(x_0, p_0 = M\dot{x_0})$. We summarise,

$$f_{sc}(x, p, t) = \int dx_0 f_0(x_0, M\dot{x}_0) \delta(p - M\dot{x}) \times \int_{x_0}^x \mathcal{D}x \int \mathcal{D}\xi[x] \exp\left[-\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' ds \xi_{t'} \varphi_2[x_s]^{-1} \xi_s\right] \times \Delta(M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_B[x_s, t'] - \xi_{t'}).$$
(6.95)

6.8.4 Discussion

In the semi-classical approximation, the time-evolution of the Wigner-distribution function is determined by Eq. (6.95). This equation describes a *stochastic process* for the center-of-mass co-ordinate $x_{t'}$ of the particle, moving within a potential V(x) under the action of a deterministic friction force $F_B[x_s, t']$,

$$F_B[x_s, t'] = -\sum_{\alpha=1}^{N} \int_0^{t'} ds \frac{\sin \Omega_{\alpha}(t'-s)}{M_{\alpha}\Omega_{\alpha}} f'_{\alpha}[x_{t'}] f_{\alpha}[x_s],$$
(6.96)

and a stochastic force $\xi_{t'}$. The motion of the particle is governed by the *stochastic integro-differential equation*

$$M\ddot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) + F_B[x_s, t'] = \xi_{t'}, \qquad (6.97)$$

where the stochastic force $\xi_{t'}$ is a random force which itself depends on the coordinate of the particle: this can be seen by the fact that its variance,

$$\langle \xi_{t'}\xi_s \rangle = \varphi_2[x] = \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2M_\alpha \Omega_\alpha} \coth \frac{\beta \Omega_\alpha}{2} \cos \Omega_\alpha (t'-s) f'_\alpha[x_{t'}] f'_\alpha[x_s], \tag{6.98}$$

depends on the particle path x_s . The Wigner distribution is obtained by integrating over all possible realisations of the stochastic force, such that Eq. (6.98) is fulfilled. Since the ξ path-integral is Gaussian, one speaks of a *Gaussian* stochastic process. This of course is due to the fact that we truncated the $y_{t'}$ expansion in the influence phase after the term quadratic in $y_{t'}$.

Our results shows that the influence of the bath is two-fold: it leads to a deterministic, retarded 'friction' force, and to a stochastic force. The latter contains the temperature and, by means of the $\coth(\beta\hbar\Omega/2)$ terms in $\varphi_2[x]$, a fully quantum mechanical description of the bath.

For certain types of system-bath couplings, one can explicitly show that the operator φ_2 is positive definite and therefore, the term quadratic in $y_{t'}$ in the original double path integral exponentially suppresses strong deviations from the diagonal paths with $y_{t'} = 0$. In this case, the expansion of the one-particle potential V,

$$-V(x+y/2) + V(x-y/2) \approx -V'(x)y$$
(6.99)

becomes more plausible. One should, however, expect that quantum mechanical effects (like particle tunneling) are destroyed by the approximation Eq. (6.99).

6.8.5 Linear Dissipation ('Ohmic Bath')

The influence phase for the linear model, Eq. (6.58), the influence phase is (cf. Eq. (6.81, 6.60, 6.59))

$$\Phi[x_{t'}, y_{t'}] = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dsy_{t'} \left\{ \operatorname{Re} L(t'-s)y_s + 2i\operatorname{Im} L(t'-s)x_s \right\} + i\mu \int_0^t dt' x_{t'} y_{t'}, \quad \mu \equiv \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \frac{c_{\alpha}^2}{M_{\alpha} \Omega_{\alpha}^2} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega} L(\tau) \equiv \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega J(\omega) \left(\operatorname{coth} \frac{\beta\omega}{2} \cos \omega \tau - i \sin \omega \tau \right), \quad (6.100)$$

whence the deterministic friction force $F_B[x_s, t']$ becomes

$$F_B[x_s, t'] = \mu x_{t'} + \int_0^{t'} ds 2 \text{Im } L(t'-s) x_s$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} x_{t'} - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \int_0^{t'} ds \sin \omega (t'-s) x_s$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} x_{t'} - \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\frac{x_{t'}}{\omega} - \frac{\cos \omega t'}{\omega} x_0 - \int_0^{t'} ds \frac{\cos \omega (t'-s)}{\omega} \dot{x}_s \right]$$

$$= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\frac{\cos \omega t'}{\omega} x_0 + \int_0^{t'} ds \frac{\cos \omega (t'-s)}{\omega} \dot{x}_s \right]. \quad (6.101)$$

The term $x_{t'}$ from the integration by parts has cancelled exactly with the counter-term $\mu x_{t'}$. If one now assumes a *linear* spectral function $J(\omega)$,

$$J_{\rm ohmic}(\omega) \equiv \eta \omega, \qquad (6.102)$$

we recover the original Caldeira-Leggett description of quantum friction (plus the additional term $2\eta x_0 \delta(t')$ that was missing there, cf. A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Physica **121 A**, 587 (1983); *ibid.* **130 A**, 374(E), (1985); Weiss book chapter 5.1),

$$F_{\text{ohmic}}[x_s, t'] = \frac{2\eta}{\pi} \int_0^\infty d\omega \left[x_0 \cos \omega t' + \int_0^{t'} ds \cos \omega (t'-s) \dot{x}_s \right]$$

= $2\eta x_0 \delta(t') + 2\eta \int_0^{t'} ds \delta(t'-s) \dot{x}_s = 2\eta x_0 \delta(t') + \eta \dot{x}_{t'}.$ (6.103)

The resulting stochastic equation of motion Eq. (6.97) is

$$M\ddot{x}_{t'} + \eta \dot{x}_{t'} + V'(x_{t'}) = \xi_{t'} - 2\eta x_0 \delta(t').$$
(6.104)

Note that the 'awkward' term $2\eta x_0 \delta(t')$ brings in a dependence on the 'initial condition' x_0 .

6.8.6 Application: Polaron-Transport

Feynman *et al.* (R. P. Feynman, R. W. Hellwarth, C. K. Iddings, and P. M. Platzman, Phys. Rev. **127** 1004 (1962), K. K. Thornber, R. P. Feynman, Phys. Rev. B **1**, 4099 (1970)), and Janssen and Zwerger (N. Janssen and W. Zwerger, Phys. Rev. B **52**, 9406 (1995)) have used the influence functional theory for the *non-equilibrium polaron problem*, i.e. the motion of a single electron coupled to optical phonons in a crystal. The periodic crystal potential is considered in the form of an effective band-mass m^* , and the potential V is due to an accelerating, homogeneous force in which case the expansion Eq. (6.99) becomes exact.

ANHANG

A. FOURIERRAUM-METHODEN

A.1 Fourier-Reihen für Bravaisgitter-periodische Funktionen

(SKRIPT FESTKÖRPERTHEORIE) Wir erinnern uns an die (komplexen) Fourier-Reihen in einer Dimension ((SKRIPT Mathematische Methoden SS 2008): Man definiert die komplexe Fourier-Reihen einer periodischen Funktion f(x) = f(x + 2L) auf dem Intervall [-L, L] als

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i\frac{n\pi}{L}x}, \quad c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^{L} dx f(x) e^{-i\frac{n\pi}{L}x}.$$
 (A.1)

mit komplexen Koeffizienten c_n . Man bezeichnet diese Darstellung von f(x) dann als Entwicklung nach ebenen (laufenden) Wellen.

Satz 4. Ein Funktion $f(\mathbf{r})$ im Ortsraum habe die Periodizität eines Bravais-Gitters \mathcal{B} , $f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = f(\mathbf{r})$ für $\mathbf{R} \in \mathcal{B}$. Dann gilt die Fourierdarstellung (Summe über das reziproke Gitter \mathcal{R}),

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}\in\mathcal{R}} f_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}, \quad f_{\mathbf{K}} = \frac{1}{v} \int_{C} d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$$
(A.2)

Das Integral läuft über eine (beliebige) primitive Einheitszelle C von \mathcal{B} mit Volumen v.

Zum Beweis sieht man zunächst, dass wegen $f(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = f(\mathbf{r})$ die Beziehung $e^{i\mathbf{KR}} = 1$ gelten muss, d.h. es muss $\mathbf{K} \in \mathcal{R}$ gelten. Weiterhin bilden die Funktionen

$$\phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} \tag{A.3}$$

ein vollständiges Orthonormalsystem auf einer EZ von \mathcal{B} mit Volumen v:

$$\int_{C} d\mathbf{r} \phi_{\mathbf{K}}^{*}(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{v} \int_{C} d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{K}' - \mathbf{K})\mathbf{r}}$$
$$= \int_{0}^{1} dx \int_{0}^{1} dy \int_{0}^{1} dz e^{2\pi i (\delta k_{x} x + \delta k_{y} y + \delta k_{z} z)} = \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K}}, \quad (A.4)$$

wobei wir das Volumenintegral auf den Einheitswürfel transformiert haben ($\mathbf{r} = x\mathbf{g}_1 + y\mathbf{g}_2 + z\mathbf{g}_3$) und dadurch das Volumen v losgeworden sind. Daraus folgt insbesondere schon der Fourier-Koeffizient $f_{\mathbf{K}}$ in Gl. (A.2). Die Vollständigkeit ist, wenn man mathematisch

korrekt sein will, etwas schwieriger zu beweisen (Hilberträume, Weierstraßscher Approximationssatz etc. siehe SKRIPT Quantenmechanik). Wir erkennen aber aus Gl. (A.2) direkt, dass

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}\in\mathcal{R}} \frac{1}{v} \int_{C} d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}'} f(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} = \int d\mathbf{r}' \left[\chi_{C}(\mathbf{r}) \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{K}\in\mathcal{R}} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \right] f(\mathbf{r}') \qquad (A.5)$$

gelten muss, wobei die charakteristische Funktion von $\chi_C(\mathbf{r})$ den Wert eins für $\mathbf{r} \in C$ hat und Null sonst.

Die eckige Klammer muss die Deltafunktion $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ ergeben - die Integration auf der rechten Seite reproduziert dann gerade $f(\mathbf{r})$, d.h.

$$\chi_C(\mathbf{r}') \times \frac{1}{v} \sum_{\mathbf{K} \in \mathcal{R}} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$
(A.6)

Wir können in dieser Formel $\chi_C(\mathbf{r}')$ loswerden, indem wir sie um $\mathbf{R} \in \mathcal{B}$ verschieben und über das ganze Bravais-Gitter \mathcal{B} summieren:

$$\sum_{\mathbf{R}\in\mathcal{B}}\chi_C(\mathbf{r}'+\mathbf{R})\times\frac{1}{v}\sum_{\mathbf{K}\in\mathcal{R}}e^{i\mathbf{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\mathbf{R})} = \sum_{\mathbf{R}\in\mathcal{B}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'+\mathbf{R})$$
(A.7)

Wegen $e^{i\mathbf{KR}} = 1$ und $\sum_{\mathbf{R}\in\mathcal{B}}\chi_C(\mathbf{r}'+\mathbf{R}) = 1$ (\mathbf{r}' muss ja in genau einer der um \mathbf{R} verschobenen Zellen liegen) gilt also die wichtige Formel (Umbenennung $\mathbf{r} - \mathbf{r}' \to \mathbf{r}$)

$$\frac{1}{v}\sum_{\mathbf{K}\in\mathcal{R}}e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{R}\in\mathcal{B}}\delta(\mathbf{r}+\mathbf{R}).$$
 (A.8)

Der Satz kann auf periodische Funktionen im **k**-Raum übertragen werden (d Dimensionen):

Satz 5. Eine Funktion $g(\mathbf{k})$ im \mathbf{k} -Raum habe die Periodizität eines reziproken Gitters \mathcal{R} , $g(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = g(\mathbf{k})$ für $\mathbf{K} \in \mathcal{R}$. Dann gilt die Fourierdarstellung (Summe über das Bravais-Gitter \mathcal{B} als reziprokes Gitter von \mathcal{R}),

$$g_{\mathbf{R}} = \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} g(\mathbf{k}), \quad g(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}\in\mathcal{B}} g_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}.$$
 (A.9)

Das Integral läuft über eine (beliebige) primitive Einheitszelle C von \mathcal{R} mit Volumen $(2\pi)^d/v$, also z.B. die erste Brillouin-Zone.

Weiterhin gilt die entsprechende Formel

$$\frac{v}{(2\pi)^d} \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{B}} e^{i\mathbf{R}\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{K} \in \mathcal{R}} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{K}).$$
(A.10)

Die Darstellung Gl. (A.9) ist in der statistischen Mechanik sehr nützlich für Variablen $g_{\mathbf{R}}$, die auf einem periodischen Gitter \mathcal{B} definiert sind.

A.2 Quadratische Form in Fourierdarstellung

Wir betrachten eine quadratische Form auf einem Bravais-Gitter \mathcal{B}

$$H \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R} \in \mathcal{B}} \sum_{\mathbf{R}' \in \mathcal{B}} \Psi_{\mathbf{R}} A_{\mathbf{R} - \mathbf{R}'} \Phi_{\mathbf{R}} \equiv \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i A_{ij} \Phi_j, \qquad (A.11)$$

wobei wir im zweiten Schritt die Gittervektoren konkret durchnummeriert haben $\mathbf{R} = \mathbf{R}_i$, $\mathbf{R}' = \mathbf{R}_j$, entsprechend $\Psi_{\mathbf{R}_i} \equiv \Psi_i$ sowie $A_{\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j} \equiv A_{ij}$. Einsetzen der Fourierzerlegung liefert (AUFGABE)

$$H = \frac{1}{2} \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k} \Psi(-\mathbf{k}) A(\mathbf{k}) \Phi(\mathbf{k}).$$
(A.12)

A.3 Inverse und Spur einer Matrix im Fourierraum

Wir können im Fourierraum einfach die Inverse A^{-1} von A berechnen (Notation $\int_{\mathbf{k}} \equiv \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k}$ zur Abkürzung):

$$\int_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{i}-\mathbf{R}_{l})} = \delta_{il} = \sum_{j} A_{ij}A_{jl}^{-1}$$

$$= \sum_{j} \int_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''} A(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{i}-\mathbf{R}_{j})}e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}_{j}}e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}_{l}}A^{-1}(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')$$

$$= \int_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''} A(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{i}}\frac{(2\pi)^{d}}{a^{d}}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}_{l}}A^{-1}(\mathbf{k},\mathbf{k}'')$$

$$= \int_{\mathbf{k},\mathbf{k}''} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{i}}e^{i\mathbf{k}''\mathbf{R}_{l}}A(\mathbf{k})A^{-1}(\mathbf{k},\mathbf{k}'')$$

$$\Rightarrow A^{-1}(\mathbf{k},\mathbf{k}'') = \frac{(2\pi)^{d}}{v}\frac{\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}'')}{A(\mathbf{k})}.$$
(A.13)

Hierbei ist natürlich wieder $A(\mathbf{k})$ (komplexe skalare Größe) die Fouriertransformierte der Matrix $A_{\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j} \equiv A_{ij}$ auf dem Bravais-Gitter.

Für die Spur einer Matrix $A_{\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j} \equiv A_{ij}$ auf dem Bravais–Gitter folgt

$$\operatorname{Tr} A = \sum_{i_1}^{N} A_{ii} = \sum_{ii}^{N} \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) = N \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k} A(\mathbf{k}).$$
(A.14)

Weiterhin gilt für eine Funktion f(A) einer Matrix auf dem Bravais–Gitter

$$\operatorname{Tr} f(A) = N \frac{v}{(2\pi)^d} \int_C d\mathbf{k} f(A(\mathbf{k})).$$
(A.15)

AUFGABE: Beweise Gl. (A.15) zunächst für $f(x) = x^2$ und dann durch Verallgemeinerung für beliebige analytische (Taylor-entwickelbare) f(x).

B. GAUBINTEGRAL

B.1 Integrale

Ein eindimensionales Gaußintegral hat die Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2 + bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}}, \quad a > 0.$$
(B.1)

Hier kann b auch komplex sein. (Für komplexes a muss zumindest $\operatorname{Re}(a) > 0$ gelten). Für ein n-dimensionales Gaußintegral hat man statt a meist eine positiv definite symmetrischer $n \times n$ -Matrix A, und statt b einen Vektor **b**. Es gilt dann

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots dx_n \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}\right) = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det A}} \exp\left(\frac{1}{2}\mathbf{b}^T A^{-1}\mathbf{b}\right).$$
(B.2)

B.2 Korrelationsfunktion

Wir betrachten das Integral

$$Z[\{q_j\}] \equiv \int D[\Phi] e^{-H + \sum_j q_j \Phi_j}, \quad D[\Phi] \equiv d\Phi_1 \dots d\Phi_N, \quad H \equiv \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \Phi_i A_{ij} \Phi_j \quad (B.3)$$

mit positiv definiter symmetrischer $N \times N$ -Matrix A, wobei über alle Werte $-\infty < \Phi_i < \infty$ integriert wird. Die Auswertung ergibt

$$\frac{Z[\{q_j\}]}{Z[0]} = e^{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} q_i (A^{-1})_{ij} q_j}.$$
(B.4)

Wenn wir andererseits den Erwartungswert

$$G_{ij} \equiv \langle \Phi_i \Phi_j \rangle \equiv \frac{\int D[\Phi] \Phi_i \Phi_j e^{-H}}{\int D[\Phi] e^{-H}}$$
(B.5)

definieren, folgt

$$G_{ij} = (A^{-1})_{ij}, \quad \frac{Z[\{q_j\}]}{Z[0]} = e^{\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} q_i G_{ij} q_j}.$$
 (B.6)

AUFGABE: a) Beweise Gl. (B.4) und Gl. (B.6), b) berechne $Z[0] \equiv \int D[\Phi] e^{-H}$.

B.3 Fourierdarstellung für G_{ij}

Wenn eine Funktion $G_{ij} \equiv G(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)$ auf dem Bravais–Gitter nur von $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ abhängt, können wir

$$G(\mathbf{R}_{i}, \mathbf{R}_{j}) \equiv v^{2} \int_{C} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^{d}} \int_{C} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^{d}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{j}} \tilde{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$$
$$= G(\mathbf{R}_{i} - \mathbf{R}_{j}, 0) \equiv \frac{v}{(2\pi)^{d}} \int_{C} d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{i} - \mathbf{R}_{j})} \tilde{G}(\mathbf{k})$$
(B.7)

schreiben. Für die dadurch definierten Fouriertransformierten gilt dann also

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{(2\pi)^d}{v} \delta^d(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \tilde{G}(\mathbf{k}).$$
(B.8)

Falls wie in Gl. (B.6) $G_{ij} = (A^{-1})_{ij}$, so können wir die Inverse im Fourierraum benutzten, d.h. wegen $\tilde{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \tilde{A}^{-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ haben wir mit Gl. (A.13) und Gl. (B.8)

$$\tilde{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{A(\mathbf{k})}.\tag{B.9}$$

B.4 Wicksches Theorem

Wir wollen den Erwartungswert

$$\langle \Phi_{i_1}...\Phi_{i_{2n}} \rangle \equiv \frac{\int D[\Phi] \Phi_{i_1}...\Phi_{i_{2n}} e^{-H}}{\int D[\Phi] e^{-H}}$$
 (B.10)

berechnen (die Anzahl der Φ muss gerade sein, sonst ist aus Symmetriegründen der Erwartungswert Null).

Zunächst gilt

$$\left\langle \Phi_{i_1}...\Phi_{i_{2n}} \right\rangle = \left. \frac{\partial^{2n}}{\partial q_{i_1}...\partial q_{i_{2n}}} \frac{Z[\{q_j\}]}{Z[0]} \right|_{q_i=0} = \left. \frac{\partial^{2n}}{\partial q_{i_1}...\partial q_{i_{2n}}} e^{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^N q_i G_{ij} q_j} \right|_{q_i=0}, \quad (B.11)$$

vgl. Gl. (B.6). Zu der Ableitung trägt nur der *n*-te Term der Taylorentwicklung der Exponentialfunktion etwas bei, da ja genau 2n Faktoren der q_i auftreten müssen, also

$$\langle \Phi_{i_1} \dots \Phi_{i_{2n}} \rangle = \frac{\partial^{2n}}{\partial q_{i_1} \dots \partial q_{i_{2n}}} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2}\right)^n \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_n} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} q_{\alpha_1} \dots q_{\alpha_n} q_{\beta_1} \dots q_{\beta_n} G_{\alpha_1 \beta_1} \dots G_{\alpha_n \beta_n}.$$
(B.12)

In der Ableitungen müssen nach der Produktregel alle (2n)! Terme auftreten, die durch die Permutationen P der Permutationsgruppe der 2n Indizes $\alpha_1...\beta_n$ gegeben sind, d.h. formal

$$\langle \Phi_{i_1} ... \Phi_{i_{2n}} \rangle = \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2} \right)^n \sum_P G_{P(i_1)P(i_2)} ... G_{P(i_{2n-1})P(i_{2n})}.$$
 (B.13)

In der Summe über die Permutationen sind natürlich viele der (2n)! Terme gleich. Es geht ja bei der Ableitung darum, die 2n Indizes i_1, \ldots, i_{2n} auf die n Korrelationsfunktionen Gaufzuteilen. Dabei kann n! mal die Reihenfolge der G geändert werden und die Indizes 2^n mal innerhalb der G vertauscht werden, ohne Wiederholung gibt es also

$$\frac{(2n)!}{n!2^n} \tag{B.14}$$

verschiedene Summanden. ¹ Der Faktor $n!2^n$ im Nenner in Gl. (B.13) kürzt sich also gerade heraus, wenn wir in der Summe nur die wirklich verschiedenen Terme mitnehmen. Diese Terme können wir durch alle möglichen *paarweise* Kontraktionen der Indizes $i_1, ..., i_{2n}$ hinschreiben, also z. B.

$$\langle \Phi_1 \Phi_2 \Phi_3 \Phi_4 \rangle = G_{12} G_{34} + G_{13} G_{24} + G_{14} G_{23}. \tag{B.15}$$

¹ Dieser Ausdruck wird manchmal auch als (2n-1)!! = (2n-1)(2n-3)... bezeichnet.

C. FUNKTIONALABLEITUNG

C.1 Variationsableitungen

Wir definieren das zunächst relativ allgemein (VOGELSANG, VL Göttingen 1988), um z.B. später auch die Maxwell- Gleichungen oder die Schrödinger-Gleichung aus einem Variationsprinzip herleiten zu können: Statt einer Funktion f(x) betrachten wir allgemeiner vektorwertige Funktionen $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, d.h. m Funktionen $(u_1(\mathbf{x}), ..., u_m(\mathbf{x}))$ mit $u_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ (sprechen aber trotzdem noch salopp von 'Funktion'). Statt der Integration über das Interval $[x_1, x_2]$ haben wir nun eine Integration über ein Gebiet $\Omega \in \mathbb{R}^n$, wobei das Integral so aussieht:

$$J[\mathbf{u}] \equiv \int_{\Omega} d^{n} \mathbf{x} F(\mathbf{x}, u_{1}(\mathbf{x}), ..., u_{m}(\mathbf{x}), \nabla u_{1}(\mathbf{x}), ..., \nabla u_{m}(\mathbf{x}))$$
(C.1)

mit einer zweimal stetig differenzierbaren Funktion F als Integrand und einmal stetig differenzierbarem $\mathbf{u}(\mathbf{x})$. Das Integral $J[\mathbf{u}]$ wird als **Funktional** aufgefaßt: jeder Funktion $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ wird eine reelle Zahl $J[\mathbf{u}]$ zugeordnet.

Definition Das Argument $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ werde ein wenig variiert, d.h. $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{x}) + \varepsilon \mathbf{h}(\mathbf{x})$ mit $\epsilon > 0$ und $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = (h_1(\mathbf{x}), ..., h_m(\mathbf{x}))$. Dann heißt

$$\delta J_{\mathbf{u}}[\mathbf{h}] \equiv \left. \frac{d}{d\varepsilon} J[\mathbf{u} + \varepsilon \mathbf{h}] \right|_{\varepsilon = 0} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{J[\mathbf{u} + \varepsilon \mathbf{h}] - J[\mathbf{u}]}{\varepsilon} \tag{C.2}$$

die 1. Variation von J im Punkt **u** in Richtung $\mathbf{h}(\mathbf{x})$.

Grob hat man folgende Analogie (vgl MM zur Richtungsableitung):

Function $f(\mathbf{x})$ | Functional $J[\mathbf{u}]$

Punkt \mathbf{x} ist ein Vektor $\in \mathbb{R}^n$ | Punkt \mathbf{u} ist eine Funktion

Gradient $\nabla f(\mathbf{x})$ (als lineares Funktional) 1. Variation $\delta J_{\mathbf{u}}$ (als lineares Funktional) Richtungsableitung $\mathbf{v} \nabla f(\mathbf{x})$ in Richtung \mathbf{v} 1. Variation $\delta J_{\mathbf{u}}[\mathbf{h}]$ in Richtung \mathbf{h} .

Definition Die Funktion $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ heißt stationärer Punkt des Funktionals J[u], wenn $\delta J_{\mathbf{u}}[\mathbf{h}] = 0$ für alle $\mathbf{h}(\mathbf{x})$, die auf dem Rand des Gebiets Ω verschwinden.

Im obigen Brachistochronen-Problem entspricht das Verschwinden auf dem Rand gerade der Bedingung $f(x_1) = y_1$ und $f(x_2) = y_2$, d.h. die gesuchte Kurve muss durch die zwei Punkte P_1 und P_2 gehen (SKIZZE).

Satz 6. Ein stationärer Punkt $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ des Funktionals J[u] genügt den Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{\partial F}{\partial u_{1,k}} - \frac{\partial F}{\partial u_{1}} = 0$$

... = ...
$$\sum_{k=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{\partial F}{\partial u_{m,k}} - \frac{\partial F}{\partial u_{m}} = 0, \quad u_{i,k} \equiv \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{k}}.$$
 (C.3)

Im Spezialfall n = 1, wo also $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(t)$ eine einparametrige Kurve im \mathbb{R}^m ist, lauten die Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{u}_{1}} - \frac{\partial F}{\partial u_{1}} = 0$$

$$\dots = \dots$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial F}{\partial \dot{u}_{m}} - \frac{\partial F}{\partial u_{m}} = 0, \quad \dot{u}_{i} \equiv \frac{\partial u_{i}}{\partial t}.$$
(C.4)

Beweis: wir betrachten zunächst m = 1, d.h. $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = u_1(\mathbf{x})$,

$$0 = \frac{d}{d\varepsilon} J[u_1 + \varepsilon h_1] \Big|_{\varepsilon=0} = \frac{d}{d\varepsilon} \int_{\Omega} d^n \mathbf{x} F(\mathbf{x}, u_1 + \varepsilon h_1, \nabla u_1 + \varepsilon \nabla h_1) \Big|_{\varepsilon=0}$$

$$= \int_{\Omega} d^n \mathbf{x} \left(\frac{\partial F}{\partial u_1} h_1 + \sum_{k=1}^n \frac{\partial F}{\partial u_{1,k}} \frac{\partial h_1}{\partial x_k} \right)$$

$$= \int_{\Omega} d^n \mathbf{x} \left(\frac{\partial F}{\partial u_1} - \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial F}{\partial u_{1,k}} \right) \right) h_1, \quad \text{part. Int., } h_1 = 0 \text{ auf dem Rand(C.5)}$$

Da das für beliebige $h_1(\mathbf{x})$ gelten muss, folgt

$$\frac{\partial F}{\partial u_1} - \sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial F}{\partial u_{1,k}} \right) = 0.$$
(C.6)

Für m > 0 geht das entsprechend, nur hat man da eine Summe über die m verschiedenen h_i , und es folgen die Euler-Lagrange-Gleichungen Gl. (C.3). Ende des Beweises.

Die hier vorgestellten Ableitungen sind Teil der **Variationsrechnung** in der Mathematik.

C.2 'Physiker-Notation'

Wir betrachten noch einmal den Fall m = 1, d.h. $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x})$ mit einem skalaren Feld $\phi(\mathbf{x})$ und dem Funktional

$$J[\phi] \equiv \int_{\Omega} d^d \mathbf{x} F(\mathbf{x}, \phi(\mathbf{x}), \nabla \phi(\mathbf{x})), \qquad (C.7)$$

wobei der Integrand F hier ganz allgemein ist und wir statt n nun d für die Dimension von \mathbf{x} schreiben.

Die erste Variation ist wie oben definiert als

$$\delta J_{\phi}[h] = \left. \frac{d}{d\varepsilon} J[\phi + \varepsilon h] \right|_{\varepsilon = 0}.$$
 (C.8)

Ausführen der Ableitung liefert

$$\delta J_{\phi}[h] = \frac{d}{d\varepsilon} \int_{\Omega} d^{d} \mathbf{x} F(\mathbf{x}, \phi + \varepsilon h, \nabla \phi + \varepsilon \nabla h) \Big|_{\varepsilon=0}$$

$$= \int_{\Omega} d^{d} \mathbf{x} \left(\frac{\partial F}{\partial \phi} h + \sum_{k=1}^{d} \frac{\partial F}{\partial (\partial_{k} \phi)} \frac{\partial h}{\partial x_{k}} \right)$$

$$= \int_{\Omega} d^{d} \mathbf{x} \underbrace{\left(\frac{\partial F}{\partial \phi} - \sum_{k=1}^{d} \left(\frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{\partial F}{\partial (\partial_{k} \phi)} \right) \right)}_{\equiv \frac{\delta J}{\delta \phi(\mathbf{x})}} h. \quad (C.9)$$

Damit ist die 'Physiker–Variationsableitung' $\frac{\delta J}{\delta \phi({\bf x})}$ definiert. Beispiele:

$$J[\phi] \equiv \int_{\Omega} d^{d}\mathbf{x} \underbrace{\left(\nabla\phi(\mathbf{x})\right)^{2}}_{\equiv F} \rightsquigarrow \frac{\delta J}{\delta\phi(\mathbf{x})} = -\sum_{k=1}^{d} \left(\frac{\partial}{\partial x_{k}} \frac{\partial F}{\partial(\partial_{k}\phi)}\right)$$
$$= -\sum_{k=1}^{d} \frac{\partial}{\partial x_{k}} 2\frac{\partial}{\partial x_{k}} \phi(\mathbf{x}) = -2\Delta\phi(\mathbf{x}). \quad (C.10)$$

Wir können uns die Variationsableitung durch die Entwicklung

$$J[\phi + \varepsilon h] = J[\phi] + \varepsilon \int_{\Omega} d^d \mathbf{x} \frac{\delta J}{\delta \phi(\mathbf{x})} h(\mathbf{x}) + O(\epsilon^2)$$
(C.11)

bei Bedarf immer direkt herleiten (geht so meist am schnellsten).