

# Noter til statistisk fysik II

3. januar 2012

Jens Egebjerg Bækhøj &  
Christian Kraglund Andersen

Institut for Fysik og Astronomi  
Aarhus Universitet, Denmark

## Indhold

<b>Indhold</b>	<b>i</b>
<b>1 Termodynamik</b>	<b>1</b>
1.1 Systemet og dets variable . . . . .	1
1.2 Termodynamikkens love . . . . .	1
1.3 Termodynamiske potentialer . . . . .	2
1.4 Varmekapacitet og andre respons-funktioner . . . . .	3
<b>2 Ensembler</b>	<b>5</b>
2.1 Mikrokanonisk ensemble (N,V,E) . . . . .	5
2.2 Kanonisk ensemble (V,T,N) . . . . .	6
2.3 Grandkanonisk ensemble (V,T, $\mu$ ) . . . . .	7
2.4 Gibbs ensemblet -det generelle ensemble . . . . .	8
<b>3 Faseskift</b>	<b>9</b>
3.1 Termodynamik for faseskift . . . . .	9
3.2 Magnetisering beskrevet med Ising modellen, 1D . . . . .	9
3.3 Middelfelts teori for Ising modellen . . . . .	10
3.4 Bragg-Williams approksimationen . . . . .	14
3.5 Bethe approksimationen . . . . .	14
3.6 Opførsel for middelfelts approksimationer nær den kritiske temperatur . . . . .	16

3.7	Eksakt løsning af Ising 1D . . . . .	17
3.8	Eksakt løsning af Ising 2D (skitseret) . . . . .	18
3.9	Landau teori for faseskift . . . . .	18
3.10	Korrelations længde og Ginzburg kriteriet . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Scaling, universalitet og renormalisering</b>	<b>23</b>
4.1	Kadanoffs tilgang . . . . .	24
4.2	Universalitet . . . . .	25
4.3	Renormalisering for 1D Ising model . . . . .	25
4.4	Renormalisering for 2D Ising model . . . . .	26
4.5	Renormalisering generelt . . . . .	28
<b>5</b>	<b>Stokastiske processer</b>	<b>31</b>
5.1	Markov processer . . . . .	31
<b>6</b>	<b>Ude af ligevægt</b>	<b>33</b>
6.1	Onsager og fluktationer-dæmpning . . . . .	33
6.2	Fluktationer og arbejde . . . . .	34
6.3	Tidsinverterede veje . . . . .	35

# Kapitel 1

## Termodynamik

### 1.1 Systemet og dets variable

Er et systems termodynamiske variable uafhængige af tiden, siges det at være i en *steady state tilstand*. Er der ydermere ingen makroskopisk strøm af fx varme eller partikler, siges systemet at være i Ligevægt.

Et system siges at være *quasistatisk*, hvis enhver ændring af systemet forgår uendeligt langsomt. Et quasistatisk system, hvor det til enhver tid er muligt at føre systemet tilbage til dets tilstand umiddelbart før, kaldes for et *reversibelt* system. Et eksempel på en reversible proces er opvarmning af en gas i en cylinder, hvorved gassen udvides.

En variable kaldes for *extensiv*, hvis den er proportional med systemets størrelse. Følgende er eksempler på extensive variable:

$$E, V, S, N \quad (1.1)$$

En variable kaldes for *intensiv*, hvis den er uafhængig af systemets størrelse. Følgende er eksempler på intensive variable:

$$P, T, \mu \quad (1.2)$$

### 1.2 Termodynamikkens love

#### 0. lov

*Hvis et system A er i ligevægt med de to systemer B og C, er B og C også i ligevægt med hinanden.*

Termodynamikkens 0. lov gør os i stand til at definere et universelt mål for fx temperatur og andre intensive størrelser.

#### 1. lov

Den første lov, fortæller at der er energibevarelse i et system, men den gør mere end det, da den opdeler energien i to bidrag, så den indre energi er givet ved:

$$dE = \delta Q - \delta W \quad (1.3)$$

Hvor  $Q$  er defineret som varmen tilført til systemet, mens arbejdet  $W$  er defineret som arbejdet udført af systemet på omgivelserne.  $dE$  er et eksakt differential,

da det ikke afhænger af vejen mellem start og slut tilstand for systemet. Generelt gælder det at:

$$\delta W = - \sum_j X_j dx_j \quad (1.4)$$

Hvor  $X_j$  er den *generaliserede kraft*, hvilket er en intensiv variable.  $x_j$  er den *generaliserede forskydning*, hvilket er en extensiv variable.

## 2. lov

$$\delta Q|_{rev} = TdS \quad , \quad \delta Q|_{irrev} < TdS \quad (1.5)$$

$TdS$  er arbejde udført på systemet (se (1.4)). Det betyder bl.a. at varme ikke kan løbe fra et system med lav temperatur til et område med høj temperatur, uden at et arbejde bliver gjort på systemet. Kombineret med termodynamikkens første lov, har vi nu:

$$dE \leq TdS + \sum_i X_i dx_i \quad (1.6)$$

Hvor lighedstegnet kun gælder for en reversible proces.

## 1.3 Termodynamiske potentialer

### Helmholtz fri energi $A(T, V, N)$

Definition:

$$A = E - TS \quad (1.7)$$

$$dA = dE - d(TS) = \delta Q - TdS - SdT - \delta W \quad (1.8)$$

For en *isoterm* proces gælder det at:

$$dA = dE - d(TS) = \delta Q - TdS - \delta W \quad \Rightarrow \quad (1.9)$$

$$\delta W|_{irrev} = \delta Q - TdS - dA \leq -dA \quad (1.10)$$

Det sidste lighedstegn gælder pga. termodynamikkens 2. hovedsætning. (1.10) fortæller os, at  $-dA$  er det maksimale arbejde vi kan trække ud af et system, ved konstant temperatur.

Vi ser også af (1.10), at er temperaturen og den generaliserede forskydning  $x_j$  (V her!) fastholdte ( $\delta W = 0$ ), så kan en spontan proces kun sænke  $A$ . Når  $T$  og  $x_j$  er fastholdte, gælder det altså at ligevægtstilstanden er den tilstande, der minimere  $A$ .

### Gibbs fri energi $G(T, P, N)$

$$G = A + PV \quad (1.11)$$

For fastholdt  $T$  og  $P$ , gælder det at et en spontan proces kun kan sænke  $G$ . Udover disse to meget anvendte potentialer, findes der også et såkaldt *grand-kanonisk ensemble*:

$$\Omega_G = A - \mu N \quad (1.12)$$

**Nyttige relationer**

Fra de frie energier, kan vi opnå følgende tilstandsligninger:

$$\frac{\partial A}{\partial T_{N,V}} = -S \quad , \quad \frac{\partial A}{\partial V_{T,N}} = -P \quad , \quad \frac{\partial A}{\partial N_{T,V}} = \mu \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial G}{\partial T_{N,P}} = -S \quad , \quad \frac{\partial G}{\partial P_{T,N}} = V \quad , \quad \frac{\partial G}{\partial N_{T,P}} = \mu \quad (1.14)$$

$$(1.15)$$

Fra (1.6) for en reversible proces har vi (gælder for mikrokanonisk ensamble, men første også for kanonisk.):

$$dS(E, N, V) = \frac{dE}{T} + \frac{PdV}{T} - \frac{\mu dN}{T} \quad (1.16)$$

Hvilket giver os:

$$\frac{\partial S}{\partial E_{N,V}} = T^{-1} \quad , \quad -T \frac{\partial S}{\partial N_{E,V}} = \mu \quad , \quad T \frac{\partial S}{\partial V_{N,E}} = \mu \quad (1.17)$$

**1.4 Varmekapacitet og andre respons-funktioner**

Varmekapacitet for fastholdt volumen og tryk:

$$C_V = \left( \frac{\partial Q}{\partial T} \right)_V = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \quad (1.18)$$

$$C_P = \left( \frac{\partial Q}{\partial T} \right)_P = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_P \quad (1.19)$$

Sammentrykkelighed for fastholdte temperaturer og entropi(adiabatisk):

$$K_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \quad (1.20)$$

$$K_S = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_S \quad (1.21)$$

Den termiske udvidelses koefficient:

$$\alpha = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,N} \quad (1.22)$$

'Sjov' relation:

$$C_P - C_V = \frac{TV}{K_T} \alpha^2 \quad (1.23)$$



## Kapitel 2

# Ensembler

### 2.1 Mikrokanonisk ensemble (N, V, E)

Betragter et lukket system. Det kan fx være N partikler indeholdt i en box, hvis væge ikke tillader nogen vekselvirkning med verden udenfor. Vi definerer nu en tilstand i systemet (dvs. position og impuls for én bestemt tid), som en vektor  $\mathbf{x}(t)$  i det  $6N$ -dimensionselle faserum.

For fastholdt energi, vil tilstandene  $\mathbf{x}(t)$  bevæge sig på en  $6N-1$  dimensional overflade  $\Gamma(E)$  i faserummet, vi kan nu beskrive en makroskopisk (målbar) størrelse  $\phi$  ved dennes middelværdi:

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \phi(\mathbf{x}(t)) \quad (2.1)$$

For  $t \rightarrow \infty$ , vil  $\mathbf{x}(t)$  have besøgt hele  $\Gamma(E)$ . Dette gælder for 'ergodic systems', hvilket betyder at alle microtilstande i faserummet er lige sandsynlige, hvilket igen betyder sandsynligheden for at være i netop tilstanden  $\nu$  er givet ved:

$$P_\nu = \frac{1}{\Omega} \quad (2.2)$$

Hvor  $\Omega(E)$  kaldes den statistiske vægt, og er summen af alle tilstande i faserummet med den rette energi:

$$\Omega(E) = \frac{1}{h^{3N}} \int_{E \leq H(\mathbf{x}) \leq E+\delta E} d^{6N}x \quad (2.3)$$

Vi integrerer altså over alle tilstande, der ligger inden for en vis afstand af en konstant-energi-overflade i faserummet. Kun enheden af  $h$  (virkning) er vigtig for en klassisk fysisk fortolkning.

Kontakt til termodynamikken kan skabes gennem Boltzmanns entropi formel:

$$S \equiv k_B \ln(\Omega) \quad (2.4)$$

For et større system bestående af flere af de ovenstående systemer, gælder det at:

$$\Omega_{\text{total}} = \prod_n \Omega_n \quad (2.5)$$

Hvilket fører til:

$$S_{\text{total}} = \sum_n S_n \quad (2.6)$$

Det gælder, at der er flere mikrotilstande for højere energier  $\Rightarrow$  større  $\Omega \Rightarrow$  større entropi.

Fra første hovedsætning, samt antagelsen om at vi ser på en reversibel proces (her ligevægt), har vi for det mikrokanoniske ensemble:

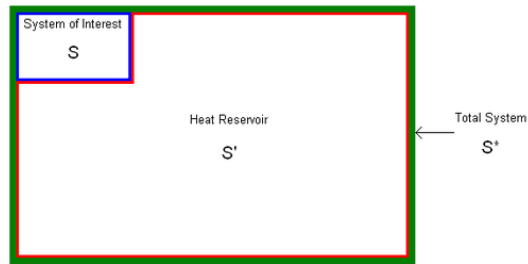
$$dS = \frac{dE}{T} + \frac{PdV}{T} - \frac{\mu dN}{T} \quad (2.7)$$

Vi ser heraf, at vi kan finde temperaturen som:

$$T = \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)^{-1} \quad (2.8)$$

## 2.2 Kanonisk ensemble (V,T,N)

Vi betragter nu et system som vist i Figure 2.1.



Figur 2.1: Systemet vi betragter, er i termisk kontakt med et meget større varmebad, således at temperaturen er konstant. Væggene tillad en energistrøm gennem sig, hvorved energi fluktuere mellem de to systemer.

Antallet af partikler ( $N_1, N_2$ ) og volumen ( $V_1, V_2$ ) for de to systemer er fastholdt. Energien kan fluktuere mellem systemerne, men den totale energi er konstant:

$$E_{\text{total}} = E_1 + E_2 = \text{konst.} \quad (2.9)$$

Sandsynligheden for at vores system (1) har en bestemt energi  $E_1$ , er givet ved:

$$P_1(E_1) = \frac{\#(E_1)}{\#(\text{Alle energier})} \quad (2.10)$$

Eller hvis vi genindfører den statistiske vægt ( $\Omega$ ) fra (2.3) for de to systemer ( $\Omega_1, \Omega_2$ ):

$$P_1(E_1) = \frac{\Omega_1(E_1)\Omega_2(E - E_1)}{\int_0^E \Omega_1(E_1)\Omega_2(E - E_1)dE_1} \quad (2.11)$$



Fra definitionen af entropi (2.4) har vi at:

$$\Omega_2(E - E_1) = \exp\left(\frac{S_2(E - E_1)}{k_B}\right) \quad (2.12)$$

Fra en rækkeudvikling af entropien, og anvendelse af (1.16,1), får vi nu:

$$\Omega_2(E - E_1) = \exp\left(\frac{-E_1}{k_B T}\right) \quad (2.13)$$

Dette gør os i stand til at omskrive (2.9) til:

$$P_1(E_1) = \frac{\Omega_1(E_1)e^{-\beta E_1}}{Z_c} \quad (2.14)$$

Hvor den *kanoniske tilstandssum*  $Z_c$  er givet ved:

$$Z_c = \int_0^E dE_1 \Omega_1(E_1) e^{-\beta E_1} \quad (2.15)$$

For diskrete energiniveauer erstattes integralet med en sum.

### Nyttige relationer

$$A = -k_B T \ln(Z_c) \quad (2.16)$$

$$\langle E \rangle - \frac{\partial \ln(Z_c)}{\partial \beta} = \frac{\partial(\beta A)}{\partial \beta} \quad (2.17)$$

Et mål for fluktuationerne i energien er givet ved:

$$\frac{\sqrt{\langle \Delta E^2 \rangle}}{\langle E \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (2.18)$$

For et stort system er fluktuationerne altså små.

### 2.3 Grandkanonisk ensemble ( $V, T, \mu$ )

I dette Ensemble, forstiller vi os nu samme opstilling som i Figure 2.1, men med mulighed for udveksling af partikler mellem de to systemer. Det totale antal partikler i de to systemer er konstant, så vi har:

$$E_{\text{total}} = E_1 + E_2 = \textit{konst.} \quad (2.19)$$

$$N_{\text{total}} = N_1 + N_2 = \textit{konst.} \quad (2.20)$$

Sandsynligheden for, at det lille system har energien  $E_1$  og indeholder  $N_1$  partikler, er givet ved:

$$P_1(E_1, N_1) = \frac{\Omega_1(E_1, N_1) e^{-\beta(E_1 - \mu N_1)}}{Z_G} \quad (2.21)$$

Hvor den *grandkanoniske tilstandssum* er givet ved:

$$Z_G = \sum_{N_1=0}^N Z_c(T, N_1) e^{\beta N_1 \mu} \quad (2.22)$$

Hvor vi har en sum i stedet for et integral, da antal partikler ikke er en kontinuert størrelse.

**Nyttige relationer**

$$\langle N_1 \rangle = \frac{\partial \ln(Z_G)}{\partial \beta \mu} \quad (2.23)$$

$$\frac{\sqrt{\langle \Delta N_1^2 \rangle}}{\langle N_1 \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N_1}} \quad (2.24)$$

Igen ser vi at fluktuationerne er små for store systemer.

**2.4 Gibbs ensemblet -det generelle ensemble**

Vi ser igen på Figure 2.1. Generelt har vi (for en reversibel proces):

$$TdS = dE - \sum_i X_i dx_i \quad (2.25)$$

Hvor  $X_i$  er de generaliserede krafter og  $x_i$  er de generaliserede forskydninger. Vi vælger nu at lade en forskydning kunne fluktuere (og energien!), men fastholde den totale værdi i de to systemer, ligesom antallet af partikler kunne fluktuere i det grandkanoniske ensemble.

$$x_j^{\text{total}} = x_j^1 + x_j^2 = \textit{konst.} \quad (2.26)$$

$$E_{\text{total}} = E_1 + E_2 = \textit{konst} \quad (2.27)$$

I dette ensemble er sandsynligheden for at det ene (lille) system har energien  $E_1$  og forskydningen har værdien  $x_j^1$ , givet ved:

$$P_1(E_1, x_j^1) = \frac{\Omega(E_1, x_j^1) e^{-\beta(E_1 - X_j x_j^1)}}{Z_{\text{gen}}(T, E_1, x_j^1)} \quad (2.28)$$

Hvor tilstandssummen som altid blot er et integral (eller sum) over tælleren, der går over alle tilstande.

Den generelle frie energi er givet ved:

$$F(T, x_j) = -k_B T \ln(Z_{\text{gen}}) \quad (2.29)$$

## Kapitel 3

# Faseskift

### 3.1 Termodynamik for faseskift

Et stof er i den fase, hvor den frie energi er minimeret. At opnå den mindst mulige frie energi

$$F = E - TS$$

er ofte en 'kamp' mellem ordnede og uordnede faser. For lave temperature er det mest afgørende, for minimeringen af den frie energi størrelsen af  $E$ , hvilket ofte fører til en ordnet fase, hvor både  $E$  og  $S$  har små værdier. For høje temperature derimod, får entropien mere magt, hvilket fører til en uordnet fase. Man opdeler i to kategorier af faseskift. 1. ordens faseskift, hvor 'order parameter' er diskontinuert, og 2. ordens faseskift, hvor den er kontinuert.

### 3.2 Magnetisering beskrevet med Ising modellen, 1D

Vi iagttager nu et een-dimensionalt gitter. Vi antager nu at der på hver gitterpunkt sidder en partikel med enten spin op ( $\sigma = 1$ ) eller spin ned  $\sigma = -1$ . I denne model betragter vi det enkelte spins vekselvirkning med magnetfeltet, samt dets interaktion med den nærmeste nabo. Vekselvirkning med spin, der er placeret mere end et gitterpunkt væk, negligeres. Hamilton-operatoren for dette system er givet ved:

$$H = -J \sum_{ij}^{n.n.} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.1)$$

Hvor  $h$  er proportionalt med det magnetiske felt, men har enheden energi. Vælger vi  $J > 0$ , giver ensretning af spin en lavere energi. Det gælder generelt, at denne lavere energi vil gøre den ensrettede fase mest stabil ved lave temperaturer, mens en maksimering af entropien 'vinder' ved højere temperaturer.

Vi kan generalisere (3.1) til andet end spin- $\frac{1}{2}$  partikler, ved at lade  $\sigma_i \sigma_j \rightarrow S_{z,i} S_{z,j} = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$

### Magnetiseringen

Henholdsvis den totale magnetisering og magnetiseringstætheden er givet ved:

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad , \quad m = \frac{M}{V} \quad (3.2)$$

Vi har i vores Hamilton-operator for problemet, ikke valgt nogen foretrukken retning for spinnene (Når  $h = 0$ ), og den er derfor invariant under flip af alle spin. Derfor er spin alignment i den ene retning ligeså sandsynlig som alignment i den anden retning, når der ikke er noget ydre magnetfelt.

### 3.3 Middelfelts teori for Ising modellen

I middelfelts approksimationen, medregnes påvirkningen fra de andre spin gennem et middelfelt. Det betyder at alle fluktuationer negligeres, da dette middelfelt er ens overalt ( $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_{i+1} \rangle = \dots$ ). Vores middelfelts Hamilton-operator, bliver nu:

$$H = -J \sum_i \sigma_i q m - h \sum_i \sigma_i \quad (3.3)$$

hvor  $q$  er antallet af nærmeste naboer, hvilket gør at dette udtryk ikke kun er gyldigt i 1D. Vi er nu i stand til at udregne magnetiseringen, hvilket vi gør ved at summe over alle tilstande, ganget med sandsynligheden for at netop denne tilstand forekommer.

$$m = \langle \sigma \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\text{Alle spin}} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right) \frac{e^{-\beta H(\{\sigma_j\})}}{Z_c} \quad (3.4)$$

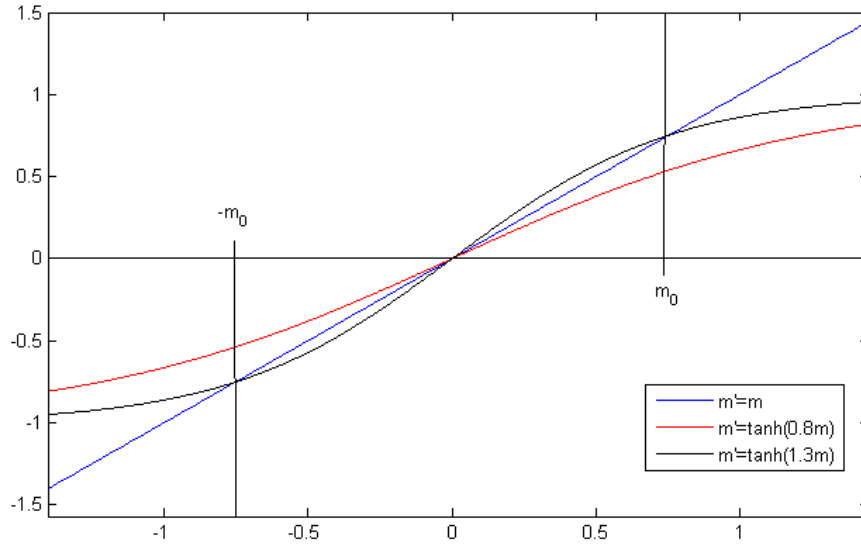
Hvor summen over alle spin betyder at man skal alle  $\sigma_j$  have værdierne  $\pm 1$ . Nu er problemet at finde tilstandssummen:

$$\begin{aligned} Z_c &= \sum_{\text{Alle spin}} e^{-\beta H(\{\sigma_j\})} \\ &= \sum_{\text{Alle spin}} e^{-\beta(Jqm+h)\sum_j \sigma_j} \\ &= \prod_{j=1}^N \sum_{\text{Alle spin}} e^{-\beta(Jqm+h)\sigma_j} \\ &= \prod_{j=1}^N 2 \cosh(\beta[Jqm + h]) \\ &= (2 \cosh(\beta[Jqm + h]))^N \end{aligned} \quad (3.5)$$

Indsat i (3.4), kan dette vises at give:

$$m = \tanh(\beta[Jqm + h]) \quad (3.6)$$

Denne ligning må løses numerisk. Kaldes vi magnetiseringen på venstre side af (3.6) for  $m'$  og det på højresiden for  $m$ , så må det gælde for en løsning, at  $m = m'$  hvilket ses som den blå linje i Figure 3.1.



Figur 3.1: Numerisk løsning af (3.6) med  $h = 0$ .

Det ses da af Figure 3.1, at vi må opdele i to tilfælde (igen for  $h = 0$ ):

$$\frac{qJ}{k_B T} < 1 \quad \Rightarrow \quad m = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{qJ}{k_B T} > 1 \quad \Rightarrow \quad m = 0, m = \pm m_0 \quad (3.8)$$

$$(3.9)$$

Hvilket betyder at der for alle temperaturer er en triviel løsning, men for:

$$T < \frac{qJ}{k_B T} = T_c, \quad (3.10)$$

findes også to ikke-trivelle løsninger.  $T_c$  kaldes for den kritiske temperatur. De to ikke-trivelle løsninger, viser sig at være de stabile løsninger, og svarer til en spontan magnetisering, da der ikke er noget ydre magnetfelt.

### Opførsel af magnetiseringen omkring den kritiske temperatur

For:

$$h = 0 \quad , \quad T \sim T_0 \quad (3.11)$$

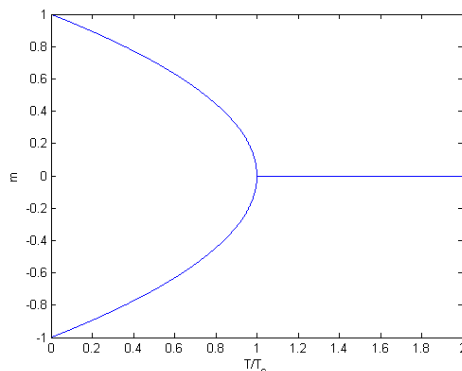
For temperaturer tæt på den kritiske, gælder det at magnetiseringen er lille, og følgende rækkeudvikling er derfor i orden:

$$\begin{aligned}
 m &= \tanh(\beta J q m) \simeq \beta q m J - \frac{1}{3}(\beta q J)^3 m^3 \quad \Rightarrow \\
 m \left(1 - \frac{T_c}{T}\right) &= -\frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^3 \quad \Rightarrow \\
 m &= \pm \sqrt{3} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T_c - T}{T}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.12)
 \end{aligned}$$

Altså

$$m \propto (T_c - T)^\beta \quad \beta = \frac{1}{2} \quad (3.13)$$

I Figure 3.2 ses magnetisering plottet for temperaturer omkring den kritiske.



Figur 3.2: Bemærk kun korrekt omkring den kritiske temperatur.

### Hvorfor faseovergang aldrig forekommer i Ising-1D for endelige T

Vi ser nu på en kæde, hvor  $J > 0$  og alle spin er ensrettet. Energien for denne tilstand er givet ved:

$$E_0 = -(N - 1)J \quad (3.14)$$

Vi indfører nu en væg, således alle spin på den ene side er spin ned, og alle spin på den anden side er spin op. Energien for denne tilstanden er givet ved:

$$E = E_0 + 2J \quad (3.15)$$

Forskellen i den frie energi for de to tilstande er givet ved:

$$\Delta A = A_{\text{Alle ensrettet}} - A_2 = 2J + \Delta S \quad (3.16)$$

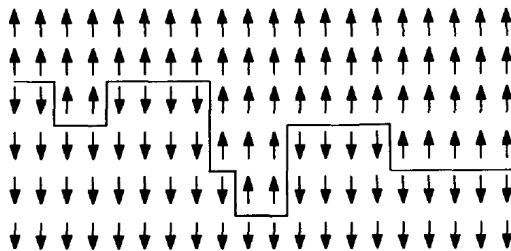
For tilstanden, hvor alle spin er ensrettet gælder det at  $S = k_B \ln(1) = 0$ , da der kun er én mulig tilstand, der giver fuld alignment. For den anden tilstand er der  $N - 1$  måder at placere vægen på, derfor bliver (3.16):

$$\Delta A = 2J - Tk_B \ln(N - 1) \quad (3.17)$$

Det betyder at i grænsen  $N \rightarrow \infty$ , vil tilstanden med en væg være den der minimerer den frie energi, for alle endelige temperaturer. Det kan vises at den frie energi kan mindske yderligere ved at indsætte flere vægge. Disse vægge forhindrer en magnetisering i at opstå, og vi ser derfor ingen faseovergang, når kun nærmeste-nabo-vekselvirkning tages med i betragtning (Eller en hvilken som helst anden endelig vekselvirkning).

### Hvorfor faseovergangen forekommer i Ising-2D

Vi har et  $N \times N$  gitter, hvor vi placerer en væg som vist i Figure 3.3.



Figur 3.3:  $N \times N$  gitter med en væg af længden  $L$

Energiforøgelsen af systemet ved at introducere væggen er givet ved:

$$\Delta E = 2LJ \quad (3.18)$$

Vælger vi at der for hvert skridt er tre muligheder for væggenes forløb, hvis vi starter fra venstre: op(25%), ned(25%) og til højre(50%). Vi anser op/ned og til højre for to muligheder med samme sandsynlighed. Det betyder at  $L = 2N$  for  $N \rightarrow \infty$ , og et overslag for entropien er:

$$S \simeq k_B \ln(2^L N - 1) \simeq k_B \ln(2^{2N} N) \quad (3.19)$$

Hvor  $2^L$  faktoren i den statistiske vægt kommer fra det faktum at kæden er  $L$  skridt lang, og der er to muligheder pr. skridt (op/ned og til højre).  $N - 1$  faktoren i den statistiske vægt er tilføjet da det er antallet af muligheder for startpunktet af kæden.

Når ovenstående indsættes i udtrykket for den frie energi ( $A = E - TS$ ), findes det at en væg sænker den frie energi, men kun hvis:

$$T > 2.88 \frac{J}{k_B} \quad (3.20)$$

Det betyder at der er mulighed for en fase med en endelig magnetisering og dermed et faseskift.

### 3.4 Bragg-Williams approksimationen

Ideen bag BW approksimationen er, at opstille et udtryk for den frie energi som en funktion af 'order parameteren' (magnetiseringen):

$$F = E - TS - hVm \quad (3.21)$$

Energien for tilstanden opnår vi ved at indsætte (middel) magnetiseringen ind på alle  $\sigma$  i (3.1):

$$E \simeq -Jm^2N\frac{q}{2} - hNm \quad (3.22)$$

Et udtryk for entropien opnår vi ved at benytte at den statistiske vægt for en given magnetisering er givet ved:

$$\Omega = \binom{N}{N_\uparrow} = \frac{N!}{N_\uparrow!(N - N_\uparrow)!} = \frac{N!}{N_\uparrow!N_\downarrow!} \quad (3.23)$$

Benytter man nu Stirlings formel ( $\ln(N!) \simeq N \ln(N) - N$ ) samt at:

$$N_\uparrow = \frac{N(1+m)}{2}, \quad N_\downarrow = \frac{N(1-m)}{2}, \quad (3.24)$$

Fåes:

$$S = Nk_B \left( \ln(2) - \frac{1}{2}[(1+m)\ln(1+m) + (1-m)\ln(1-m)] \right) \quad (3.25)$$

Vi kan opnå samme resultat som i (3.6) ved, at aflede den frie energi mht. magnetiseringen:

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 0 \quad \Rightarrow \quad m = \tanh(\beta[Jqm + h]) \quad (3.26)$$

Det viser sig altså at der opstår minimums punkter i den frie energi for en endelig magnetisering når vi er under den kritiske temperatur. se Figure 3.4. Også i denne model får man for opførslen omkring den kritiske temperatur (jvf. (3.13)) at:  $\beta = \frac{1}{2}$

### 3.5 Bethe approksimationen

Ideen i denne approksimation er, at vi udvælger en partikel og beskriver dens vekselvirkning med nærmeste naboer eksakt. Deres naboer vil derimod stadig blive beskrevet via et middelfelt. For et simpelt kubisk gitter i 2D er situationen vist i Figure 3.5.

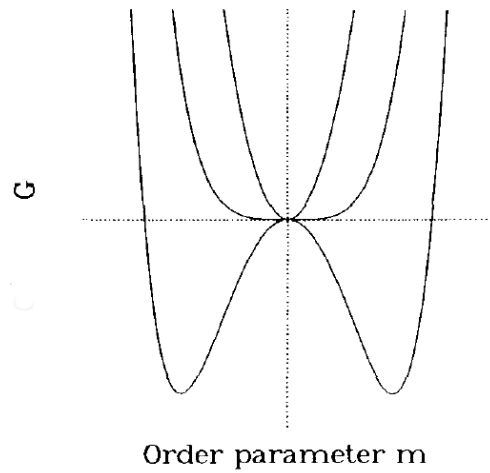
Hamilton-operatoren for denne gruppe er givet ved:

$$H_{\text{gruppe}} = -J\sigma_0 \sum_{j=1}^q \sigma_j - h\sigma_0 - h' \sum_{j=1}^q \sigma_j \quad (3.27)$$

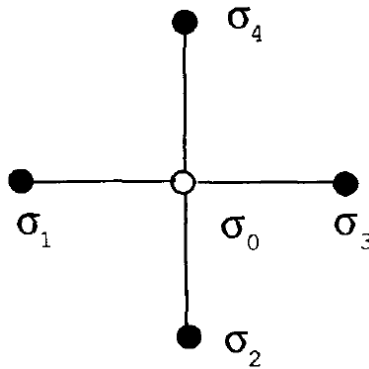
Hvor  $h'$  er et effektivt felt, der består af det faktiske magnetfelt, samt middelfeltet fra naboer til den udvalgte gruppe.

Ideen er nu at udregne tilstandssummen for systemmet ( $Z = \sum_{i, \text{Alle tilstande}} Q_i e^{-\beta H_i}$ ),





Figur 3.4: Plot for  $T > T_c$  (den smalle kurve),  $T = T_c$  og for  $T < T_c$



Figur 3.5:

og derefter finde middelværdien  $\langle \sigma \rangle$ . På grund af vores måde at bygge systemet op på, får vi ikke samme resultater for  $\sigma_0$  og de andre spin.

Vi kræver at vores system skal være isotropt, og derfor  $\langle \sigma_0 \rangle = \langle \sigma_j \rangle$  for alle  $j$ . Dette giver os følgende ligning for  $h'$ :

$$\frac{(\cosh[\beta(J + h')])^{q-1}}{(\cosh[\beta(J - h')])^{q-1}} = e^{2\beta h'} \quad (3.28)$$

Det kan vises (se figurer i forlæsningsnoter) at der for tilstrækkeligt lave temperaturer er tre løsninger. Den kritiske temperatur viser sig at være givet ved:

$$\beta_c J = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{q}{q-2} \right) \quad (3.29)$$

Dette viser sig at være en stor forbedring i forhold til den rene middelfeltsteori. I den almindelige middelfelts approksimationen negligerede vi spredning af  $\langle \sigma \rangle$ ,

og havde derfor:

$$\langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \quad (3.30)$$

I Bethe approksimationen, kan det ved at indfører vekselvirkningen mellem nærmeste naboer  $J$  som variable, vises at:

$$\sum_{\langle ij \rangle} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{Nq}{2} \tanh(\beta J) \quad (3.31)$$

Hvilket afspejler at vi ikke helt har negligeret fluktationer, men resultatet er stadig ikke korrekt. For 2 dimensioner og mere skal korrelationen mellem to spin, vokse meget mere end Bethe approksimationen forudsiger.

### 3.6 Opførsel for middelfelts approksimationer nær den kritiske temperatur

Vi bemærker først, at de kritiske eksponenter i middelfelts approksimationer ikke afhænger af dimensionen, hvilket ikke er korrekt .

Vi har set at det for magnetiseringen gælder at:

$$m \propto (T_c - T)^\beta \quad (3.32)$$

Hvor  $\beta = \frac{1}{2}$  i middelfelts approksimationen. De målte værdier for  $\beta$  er noget lavere (fx  $\sim \frac{1}{3}$  i 3D).

Det kan vises at susceptibiliteten ( $\frac{\partial m}{\partial h}$ ) divergere når man nærmer sig den kritiske temperatur (både oppefra og nedefra):

$$\chi = A_\pm |T - T_c|^{-\gamma} \quad (3.33)$$

Hvor  $\gamma = 1$  i middelfelts approksimationen. De målte værdier for  $\gamma$  er højere (fx  $\frac{7}{4}$  i den eksakte løsning for Ising 2D).

Det kan ved at indsætte middelværdien for magnetiseringen i  $\chi = \frac{\partial m}{\partial h}$ , vises at:

$$\chi \propto \sum_i \langle \sigma_0 \sigma_i \rangle - \langle \sigma_0 \rangle \langle \sigma_i \rangle, \quad (3.34)$$

der jo netop fortæller om korrelationen mellem spinene, hvilket jo er nul i (den simple) middelfelts approksimationen.

Vi kan vurdere varmekapaciteten i (den simple) middelfelts approksimationen, ved at benytte:

$$E = \langle H \rangle = -J \sum_{\langle ij \rangle} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = -\frac{N}{2} J q m^2 \quad (3.35)$$

Når dette afledes med hensyn til temperaturen, fåes:

$$C_{h=0} = \begin{cases} \frac{3}{2} N k_B & \text{For } T \rightarrow T_c^- \\ 0 & \text{For } T > T_c \end{cases} \quad (3.36)$$

Vi ser en diskontinuitet i varmekapaciteten. Dette er vist for den simple middelfelts approksimation, men det kan vises at alle middelfelts approksimationer har problemet, også Bethe approksimationen. Den korrekte opførsel er:

$$C_{h=0} = B_\pm |T - T_c|^{-\alpha} \quad (3.37)$$

### 3.7 Eksakt løsning af Ising 1D

En og to dimensionelle Ising modeller er nogle af de få systemer, hvor vi kan finde tilstandssummen og for 1D tilfældet er udtrykket endda så simpelt, at vi kan arbejde videre med det og finde diverse interessante størrelser.

Vi har som altid Hamilton-operatoren (hvor vi antager periodiske grænsebetingelser):

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \\ &= - \sum_{i=1}^N \left[ J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \end{aligned} \quad (3.38)$$

Tilstandssummen bliver nu

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left( \beta \left[ J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right) \quad (3.39)$$

Hvor vi har trukket summen ud fra eksponentialfunktionen, hvorved den er blevet til et produkt. Vi indfører nu:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{1-1} \\ P_{-11} & P_{-1-1} \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

Hvor:

$$P_{11} = e^{\beta(J+h)} \quad (3.41)$$

$$P_{-1-1} = e^{\beta(J-h)} \quad (3.42)$$

$$P_{-11} = P(1-1) = e^{-\beta J} \quad (3.43)$$

Nu kan vi opskrive tilstandssummen som:

$$Z_N = \sum_{\sigma_i = \pm 1} P_{\sigma_1 \sigma_2} P_{\sigma_2 \sigma_3} \dots P_{\sigma_N \sigma_1} = \text{Tr}(\mathbf{P}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (3.44)$$

Hvor  $\lambda_1$  og  $\lambda_2$  er henholdsvis den højeste og den laveste egenværdi for  $\mathbf{P}$ . Vi ønsker nu at finde den frie energi i den termodynamiske grænse:

$$G = -k_B T \ln(\lambda_1^N + \lambda_2^N) \rightarrow -N k_B T \ln(\lambda_1) \quad \text{For } N \rightarrow \infty \quad (3.45)$$

Vi kan nu bruge denne Gibbs frie energi til at finde magnetiseringen:

$$dG = -SdT - MdH \quad \Rightarrow \quad M = - \left( \frac{\partial G}{\partial h} \right)_T \quad (3.46)$$

Vi finder nu endelig det eksakte udtryk for magnetiseringen:

$$m = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (3.47)$$

Vi ser at hvis  $h = 0$  vil  $m = 0$  for alle  $T \neq 0$ , så der findes ikke en endelig kritisk temperatur, hvilket står i modsætning til middelfeltsapproximationen, hvor en sådan fandtes. Der vil dog være en ordnet tilstand hvis  $T = 0$  eller hvis  $h \neq 0$ .

Vi vil nu vurdere korrelationen mellem spinene. Da vi har tilstandssummen er det en ligefrem opgave at evaluere (for  $h = 0, T \neq 0$ ):

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+j} \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_{i+j} \rangle = \dots = (\tanh(\beta J))^j = e^{-\frac{j}{\xi}} \quad (3.48)$$

Hvor  $\xi$  kaldes korrelationslængden og divergerer for  $T = 0$ . Generelt har man at  $\xi$  divergerer ved kritiske punkter.

Det er nu klart, at middelfelts teorien der negliger korrelationen (eller for de mere avancerede, negliger korrelation med fjerne spin), ikke kan forventes at kunne forudsige de kritiske koefficienter korrekt, da alle spin her er korrelerede til hinanden uafhængigt af afstand.

### 3.8 Eksakt løsning af Ising 2D (skitseret)

Hamilton-operatoren for  $N \times N$ -gitteret, kan opskrives på følgende form:

$$H = -J \sum_{i=1, j=1}^N [\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}] - h \sum_{i=1, j=1}^N \sigma_{i,j} \quad (3.49)$$

Vi benytter periodiske grænsebetingelser, således at  $\sigma_{N+i,j} = \sigma_{i,j}$ . Det viser sig, at måden at fortsætte på er, at dele vores gitter op i koloner, og løse problemet for kolonerne. Dette gør os i stand til, ligesom vi gjorde i en dimension, at indfører en matrix  $\mathbf{P}$ . For dette problem er  $\mathbf{P}$  bare ikke en  $2 \times 2$  matrix, men en  $2^N \times 2^N$  matrix, med tilhørende  $2^N$  egenverdier. Igen er det dog kun den største egenverdi, der overlever i den termodynamiske grænse  $N \rightarrow \infty$ :

$$Z = \text{Tr}(\mathbf{P})^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \dots + \lambda_{2^N}^N \simeq \lambda_1^N \quad (3.50)$$

Jeg vil her ikke lade som om vi har løst problemet, for der er stadig det meget alvorlige problem, at finde den største egenverdi tilbage. Når et udtryk for tilstandssummen er fundet, er det dog ligefrem at følge (3.45) og herefter finde:

$$m = -\frac{1}{N^2} \left( \frac{\partial G}{\partial h} \right)_T \quad (3.51)$$

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} \quad (3.52)$$

$$C = \frac{\partial G}{\partial T} \quad (3.53)$$

Ved at finde disse værdier, finder man varmekapaciteten divergerer logaritmisk for  $T = T_c$  ( $\alpha = 0$ ). De andre kritiske eksponenter er:  $\beta = \frac{1}{8}$  og  $\gamma = \frac{7}{4}$ .

### 3.9 Landau teori for faseskift

Grundlaget for Landau teori for faseskift er antagelsen om, at man omkring et kritisk punkt, kan opskrive den frie energi som en potensrække i ordensparameteren. Ønkser vi at undersøge spontan magnetisering i et stof uden retningsbestemt struktur, må det gælde at  $G(m, T) = G(-m, T)$ , og ulige potenser af

magnetiseringen i potensrækken, må derfor falde bort:

$$G(m, T) = a(T) + \frac{1}{2}b(T)m^2 + \frac{1}{4}c(T)m^4 + \frac{1}{6}d(T)m^6 + \dots \quad (3.54)$$

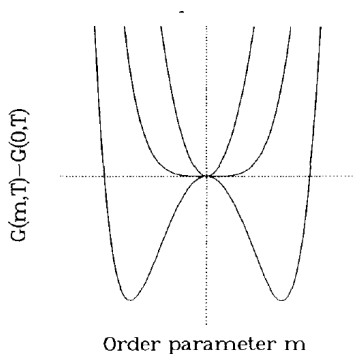
Vi vil nu se på to forskellige tilfælde

$$\underline{c, d, e... > 0, b(T)}$$

Hvor  $b$  skifter fortegn for en kritisk temperatur  $T_c$ :

$$b(T) = b_0(T - T_c) \quad (3.55)$$

I dette tilfælde får man en forskel i fri energi i forhold til fasen med  $m = 0$  som vist på Figure 3.6.



Figur 3.6: Plot for  $T > T_c$  (smalt),  $T = T_c$  og  $T < T_c$  (bredt med to minima)

Det ses af figuren, at der er tale om et 2. ordens faseskift, da der aldrig opstår lokale maksima mellem  $m = 0$ -tilstanden og tilstanden med spontan magnetisering. Det betyder at magnetiseringen er kontinuert funktion af temperaturen. Man får i denne model samme udtryk for de kritiske eksponenter som i mid-delfelts approksimationen.

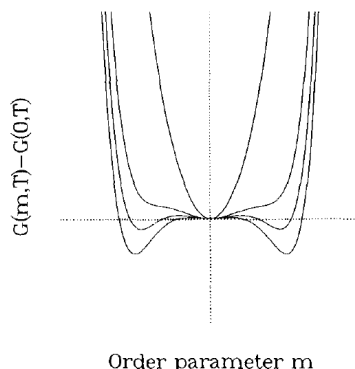
$$\underline{d, e... > 0, b(T) > 0, c(T)}$$

$b(T)$  har samme opførsel som før, men  $c(T)$  skifter nu fortegn ved en højere temperatur  $T'_c$ :

$$c(T) = c_0(T - T'_c) \quad (3.56)$$

I dette tilfælde får man en forskel i fri energi i forhold til fasen med  $m = 0$  som vist på Figure 3.7.

Der er her tale om et 1. ordens faseskift, da minimumspunktet for den frie energi i lang tid ligger i tilstanden  $m = 0$ , men ved en bestemt temperatur ændres magnetiseringen til en endelig værdi. Magnetiseringen er altså ikke en kontinuert funktion af temperaturen i dette tilfælde.



Figur 3.7: Plot for  $T > T_c$  (smalt),  $T = T_c$  og  $T < T_c$  (bredt med to minima)

### 3.10 Korrelations længde og Ginzburg kriteriet

Vi opskriver nu Hamilton-operatoren for vores Ising model som:

$$H = \left( \sum_{ij} -K_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i \lambda_i \sigma_i \right) / \beta \quad (3.57)$$

Hvor  $K_{ij}$  er en matrix, der indeholder information om koblingerne mellem de forskellige spin og  $\lambda$  er et eksternt felt (proportionalt til, men med enheden energi), som kan variere fra punkt til punkt. Der blot er divideret med  $\beta$ , for at opnå de samme koefficienter som til forelæsningerne.

For Ising modellen har vi:

$$K_{ij} = \begin{cases} \beta J & \text{For } i \text{ og } j \text{ nærmeste naboer} \\ 0 & \text{Ellers} \end{cases} \quad (3.58)$$

Vi ønsker nu at undersøge korrelations funktionen:

$$C_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (3.59)$$

Vi kan nu bruge (3.52) til at udregne tilstandssummen ( $Z = \sum_{\{\sigma_{i,j}\}} e^{-\beta H\{\sigma_{i,j}\}}$ ), og derigennem evaluere  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$  og  $\langle \sigma_i \rangle$ . Vi får følgende udtryk for korrelations funktionen. For at få nyttig information ud af udtrykket, viser det sig at vi skal lave en Fourier transformation af det, hvilket giver os:

$$C(\mathbf{k}) = \frac{1 - m^2}{1 - (1 - m^2)K(\mathbf{k})} \quad (3.60)$$

Nu kan man finde  $K(\mathbf{k})$  for et simpelt gitter, og indsætte dette udtryk i (3.60). I denne udregning (som ikke gennemgås her), definere vi en meget vigtig størrelse, nemlig korrelations længden (enhed længde):

$$\xi^{-2} \equiv \frac{q}{a_0^2} \left[ (1 + m^2) \frac{T}{T_c} - 1 \right] \quad (3.61)$$

Hvor  $a_0$  er gitterkonstanten (afstanden mellem to spin),  $q$  er koordinationsnummeret (antal naboer).  $m = 0$  lige over den kritiske temperatur, og vi ser da at korrelationslængden divergere for den kritiske temperatur.

Det viser sig, at vi nu kan opskrive (3.60) som:

$$C(\mathbf{k}) = \frac{T}{T_c} \frac{q}{a_0^2} \frac{1}{k^2 + \xi^{-2}} \quad (3.62)$$

Man kan nu lave en Fourier transformation tilbage til afstande, for at se hvorledes denne funktion afhænger af afstanden mellem vekselvirkende spin (Bessel funktion ( $\sim e^{-\frac{R}{\xi}}$ )). Vi lader her som om vi allerede har gjort dette, og ønsker at anvende dette til vurdere fluktuationen af et enkelt spin:

$$C_{ii} = \langle \sigma_i^2 \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2 \quad (3.63)$$

$$C(R=0) = \dots \propto (\xi^2)^{-\frac{(d-2)}{2}} \propto |T - T_c|^{\frac{d-2}{2}} \quad (3.64)$$

Proportionalitetstegnene gælder når vi er tæt på den kritiske temperatur. Vi ved fra middelfeltsteorien, at  $\langle \sigma \rangle \propto |T - T_c|^{\frac{1}{2}}$ . Disse ting giver os hovedresultatet:

$$\frac{\sqrt{\langle \Delta \sigma^2 \rangle}}{\langle \sigma \rangle} \propto \frac{|T - T_c|^{\frac{d-2}{4}}}{|T - T_c|^{\frac{1}{2}}} = |T - T_c|^{\frac{d-4}{4}} \quad (3.65)$$

For  $T \rightarrow T_c$  har vi:

$$(3.60) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{For } d > 4 \\ \infty & \text{For } d < 4 \end{cases} \quad (3.66)$$

Den kritiske dimension for Ising modellen er altså 4, da fluktuationerne for højere dimensioner dør ud og gør middelfelts approksimationen eksakt.





## Kapitel 4

# Scaling, universalitet og renormalisering

Vi kender følgende opførsler omkring den kritiske temperatur:

$$\chi(0, T) \propto |T - T_c|^{-\gamma} \quad (4.1)$$

$$C(0, T) \propto |T - T_c|^{-\alpha} \quad (4.2)$$

$$m(0, T) \propto (T_c - T)^\beta \quad (4.3)$$

$$m(h, T_c) \propto |h|^{\frac{1}{\delta}} \text{sign}(h) \quad (4.4)$$

Ud fra disse relationer og en termodynamisk analyse, hvor vi bl.a. stiller som krav at varmekapaciteten altid skal være positiv, får vi følgende relation:

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (4.5)$$

I virkeligheden viser det sig, at det altid er et lighedstegn, der indgår i (4.5), hvilket gør de kritiske eksponenter afhængige af hinanden (i en højere grad end ellers).

Antager vi at den frie energi skalere på følgende måde:

$$G(t, h) = \lambda^{-d} G(\lambda^y t, \lambda^x h) \quad (4.6)$$

Hvor  $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ . Vi får nu fra (4.6) at:

$$\alpha = \frac{2y - d}{y} \quad (4.7)$$

$$\beta = \frac{d - x}{y} \quad (4.8)$$

$$\gamma = \frac{2x - d}{y} \quad (4.9)$$

$$\delta = \frac{x}{d - x} \quad (4.10)$$

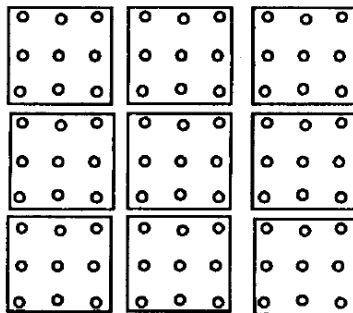
Det ses herfra at de kritiske eksponenter udelukkende afhænger af systemets dimension og måden det 'scaler' på.

Fra denne analyse får vi også at de kritiske eksponenter skal være ens på begge sider af den kritiske temperatur. Vi ser af (4.7-10), at disse igen giver os (4.5), men yderligere også:

$$\beta(\delta - 1) = \gamma \quad (4.11)$$

### 4.1 Kadanoffs tilgang

Vi ser nu på en  $d$ -dimensional Ising model, der er tæt på et kritisk punkt, hvilket betyder at korrelationslængden er meget stor. Dette systems afstand fra ligevægt beskrives ved  $h' = h - h_c$  og  $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ . Ideen er nu at erstatte spin med grupper af spin som det ses for 2D i Figure 4.1.



Figur 4.1: Spin inddeles i felter, der har sidelængden  $L$ , der måles i forhold til den afstand mellem gitterpunkter. Her er  $L = 3$ .

Den  $j$ 'te gruppe erstattes af ét spin, således at  $\sigma_j = \pm 1$ . Dette nye systems afstand fra ligevægt kan beskrives ved  $\tilde{h}'$  og  $\tilde{t}$ , der må for en sådan udskiftning gælde at:

$$\tilde{h}' \rightarrow -\tilde{h}' \quad \text{Hvis} \quad h' \rightarrow -h' \quad (4.12)$$

$$\tilde{t} \rightarrow \tilde{t}' \quad \text{Hvis} \quad h' \rightarrow -h' \quad (4.13)$$

$$\tilde{t} = \tilde{h}' = 0 \quad \text{Hvis} \quad h = 0 \quad (4.14)$$

Følgende relationer overholder dette:

$$\tilde{h}' = h' L^x \quad (4.15)$$

$$\tilde{t} = t L^y \quad (4.16)$$

Hvor det eneste krav til  $x$  og  $y$  er at de er positive og større end 1, således at de nye system er længere fra det kritiske punkt end det gamle. Dette gør os i stand til at vise at (4.6) var en rimelig antagelse, da den frie energi må afhænge på samme måde af  $\tilde{h}'$  og  $\tilde{t}$  for det nye system, som den gjorde af  $h'$  og  $t$  for det gamle system:

$$G(\tilde{t}, \tilde{h}') = L^{-d} G(L^y t, L^x h') \quad (4.17)$$

Da det vi har gjort blot er at 'zoome' ind på gitteret, må det gælde for korrelationslængden at:

$$\xi(\tilde{t}, \tilde{h}') = L \xi(L^y t, L^x h') \quad (4.18)$$

Bemærk at korrelationslængden er længere, da vi har fjernet os fra det kritiske punkt. Vi kan nu arbejde videre og finde følgende sammenhæng (se (4.7)):

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (4.19)$$

Hvor  $\nu$  er den kritiske eksponent for korrelationslængden:

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (4.20)$$

En god måde at teste 'scaleing-reglerne' er at teste dem for 2D Ising, da vi her kender alle størrelserne, da problemet kan løses eksakt.

## 4.2 Universalitet

De kritiske eksponenter afhænger ikke af gittertypen. To ting viser sig vigtige for eksponenternes opførsel, den ene er som vi har set systemets dimension ( $d$ ). Den anden er spin rummets dimension  $n$  (Ising:  $n=1$ , Heisenberg ( $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ ):  $n=3$ ).

Det viser sig det er symmetrien af Hamilton-operatoren og ikke  $n$ , der er afgørende. Altså gælder det at systemers kritiske eksponenter opfører sig ens, hvis systemerne har samme dimension og Hamilton operatoren har samme symmetrier.

## 4.3 Renormalisering for 1D Ising model

Hamilton-operatoren for problemet er givet ved (dimensionsløs udgave):

$$H = K \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad K = \beta J, \quad h \rightarrow \beta h \quad (4.21)$$

Vores 'trick' er nu at indsætte  $\sigma_i = \pm 1$  for alle lige spin, og derved opnå et udtryk for tilstandssummen, der kun indeholder de ulige spin; altså udtrykke tilstandssummen for vores system, gennem et nyt system med en ny koblingskonstant  $K'$  og oplevende et nyt felt  $h'$ . Vi starter med at opskrive tilstandssummen:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left( \sum_{i=1}^N K \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sigma_i \right) \\ &= \sum_{\{\sigma_i\}, \text{ulige}} \exp \left( \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_3) \right) (\exp [k(\sigma_1 + \sigma_3) + h] + \exp [-(k(\sigma_1 + \sigma_3) + h)]) \\ &\quad \times \exp \left( \frac{h}{2} (\sigma_3 + \sigma_5) \right) \dots \end{aligned} \quad (4.22)$$

(4.22) kan gennem definition af en funktion  $g(K, h)$ , der afhænger af de oprindelige størrelser for kobling og felt, skrives som:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left( N g(K, h) + \underbrace{\sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[ K' (\sigma_{2i+1} \sigma_{2i+3}) + \frac{h}{2} (\sigma_{2i+1} \sigma_{2i+3}) \right]}_{Z(\frac{N}{2}, K', h')} \right) \quad (4.23)$$

Altså ser vi at:

$$Z(N, K, h) = e^{Ng(K, h)} Z\left(\frac{N}{2}, K', h'\right) \quad (4.24)$$

Vi kan nu forsætte forfra, og fjerne alle lige spin i det nye system. Det vigtige at bemærke er at  $g(K)$  har samme form, nu naturligvis med  $K \rightarrow K'$ . Hver gang vi fjerner halvdelen af spinene i vores system, kan det vises at:

$$K = \frac{J}{k_B T} \geq K' \quad (4.25)$$

Med lighed kun når  $K = 0$  eller  $K = \infty$ , hvilket kaldes *fixed points*. Vi ser altså at hver renormalisation fører os til højere temperaturer og væk det kritiske punkt. Dette stemmer overens med vores forventning om at:

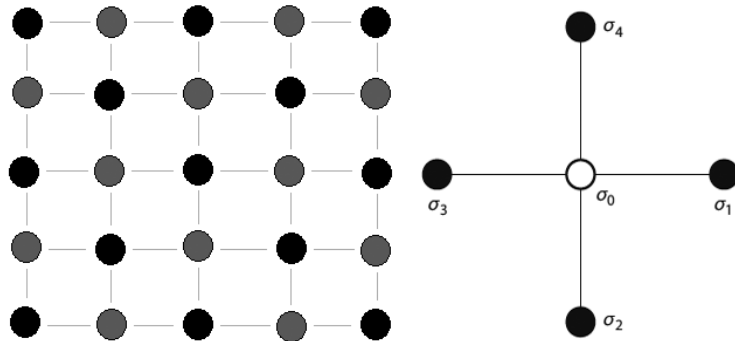
$$\xi_{\text{Nyt system}} = \frac{1}{2} \xi_{\text{Gammelt system}} \quad (4.26)$$

I enheder af de enkle systemers afstande mellem gitterpunkter. Det viser sig at feltet  $h'$  stiger for hver renormalisering.

Fra disse udregninger ser vi at der ikke er en endelig kritisk temperatur for 1D-Ising modellen. Dette kan vi se ud fra  $K$ 's opførsel ved iterationer, som giver os en højere temperatur og dermed giver mere uorden per iteration. Efter mange iterationer, vil både  $K$  og  $\xi$  gå mod nul, da dette svarer til at gå til høje temperature.

#### 4.4 Renormalisering for 2D Ising model

Antager i det følgende, at der ikke er påtrykt noget ydre magnetfelt ( $h = 0$ ) og periodiske grænsebetingelser. Ligesom vi gjorde i 1 dimension, opdeler vi nu gitteret i to undergitter, se Figure 4.2.



Figur 4.2:

Det nye undergitter, betyder at ethvert spin sidder således at alle nærmeste naboer sidder i det andet gitter. Vi udvælger nu et spin ( $\sigma_0$ ), og ser på dets

bidrag til tilstandssummen:

$$Z_1 = \sum_{\sigma_0} e^{K\sigma_0(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} \quad (4.27)$$

$$\stackrel{?}{=} e^{g(K)} \exp\left(\frac{K'}{2} [\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1]\right) \quad (4.28)$$

Hvor  $K$  er koblingsstyrken, og er defineret som i 1D tilfældet. (4.28) er et forsøg på at anvende samme fremgangsmåde som i 1D, hvor tilstandssummen for det fulde gitter, blot er givet ved tilstandssummen for undergitteret moduleret af en funktion, der af den oprindelige koblingsstyrke. Dette viser sig dog ikke at være muligt, men i et forsøg på at følge denne (lidt forkerte) strategi, kan vi prøve at indsætte følgende 4 sæt af  $\sigma$ -værdier i håbet om at bestemme de to ubekendte ( $g(K)$  og  $K'$ ):

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 \quad (4.29)$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = -\sigma_4 \quad (4.30)$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 = -\sigma_3 = -\sigma_4 \quad (4.31)$$

$$\sigma_1 = -\sigma_2 = \sigma_3 = -\sigma_4 \quad (4.32)$$

Da der her er 4 ligninger med 2 ubekendte, har vi et overbestemt ligningssystem, men det løser vi ved at indfører 2 nye variable. Disse er koblingsstyrken mellem næst-nærmeste naboer  $K_2$  og en koblingsstyrke for en kobling mellem alle fire spin, så (4.27) nu kan skrives som:

$$Z_1 = e^{g(K)} \exp\left(\frac{K'}{2} [\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1]\right) \exp(K_2 [\sigma_1\sigma_3 + \sigma_4\sigma_2]) \exp(K_4 \sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4) \quad (4.33)$$

Vi kan nu bruge (4.29-32) til at finde udtryk for vores fire variable ( $g(K)$ ,  $K'$ ,  $K_2$  og  $K_4$ ). Vi husker nu tilbage på, hvad vores oprindelige mål var, nemlig at erstatte vores Ising model med en anden Ising model, men det er jo ikke, hvad vi har gjort nu, da vi har medtaget flere vekselvirkninger. Et naivt forsøg kunne være at sætte  $K_2 = K_4 = 0$ , men det viser sig kun at fører til 'fixed points' ved  $K = 0$  og  $K = \infty$ .

Fremgangsmåden, der giver et fornuftigt resultat viser sig at være  $K_4 = 0$ , og så definere en nu nærmeste nabo vekselvirkning  $\bar{K}'$  ved at kigge på tilstanden, hvor alle spin peger i samme retning, da det her gælder at:

$$NK' + NK_2 \simeq N\bar{K}' \quad \Rightarrow \quad K' + K_2 \simeq \bar{K}' \quad (4.34)$$

Ligningen vi får ud af dette er:

$$\bar{K}' = \frac{3}{8} \ln(\cosh(4K)) \quad (4.35)$$

(4.35) har et kritisk punkt ( $\bar{K}' = K$ ) for endelige  $K$ . Dette punkt er ustabil i den forstand, at (For små ændringer i  $K$ ):

$$\frac{d\bar{K}'}{dK} = 1.45 \quad (4.36)$$

Hvilket betyder at vi bevæger os væk fra dette kritiske punkt for hver renormalisation, så starter vi ved en  $K$ -værdi der er højere end vores fixed point, så vil  $K \rightarrow \infty$  og dermed  $\xi \rightarrow \infty$  for det makroskopiske system, hvilket betyder at vi har en ordnet tilstand. Tilsvarende vil en  $K$ -værdi, der er lavere en fixed point gå mod 0 og vi har samme situation som i 1D.

### Den kritiske eksponent $\nu$

Da gitterkonstanten i det nye gitter er  $\sqrt{2}$  gange gitterkonstanten i det gamle gitter, har vi nu ( $h = 0$ ):

$$\xi(t, 0) = \sqrt{2}\xi(\sqrt{2}^y t, 0) \quad (4.37)$$

Vi kan nu finde  $\nu$  gennem sammenhængen  $y = \frac{1}{\nu}$ . Vi kigger nu på temperaturen:

$$t' = t(\sqrt{2})^y \Rightarrow y = \frac{1}{\ln(\sqrt{2})} \ln\left(\frac{t'}{t}\right) = \frac{1}{\nu} \quad (4.38)$$

Temperaturene kan findes fra koblingskonstanterne via den sædvanlige relation:

$$K = \frac{J}{k_B T} \quad (4.39)$$

For at finde den kritiske eksponent for vores 2D-model, approksimeres  $\frac{t'}{t}$  med  $\frac{dK'}{dK}$  så vi finder  $\frac{1}{\nu} = 1,07$ .

## 4.5 Renormalisering generelt

Vi indfører en vektor af koblingskonstanter:

$$\mathbf{K} = (K_1, K_2, \dots, K_n) \quad (4.40)$$

Det skal gælde for denne vektor, at den indeholder samme slags vekselvirkninger efter renormalisering. Hamilton-operatoren (dimensionløs! se (4.21)) før og efter renormaliseringen, vil da have følgende form:

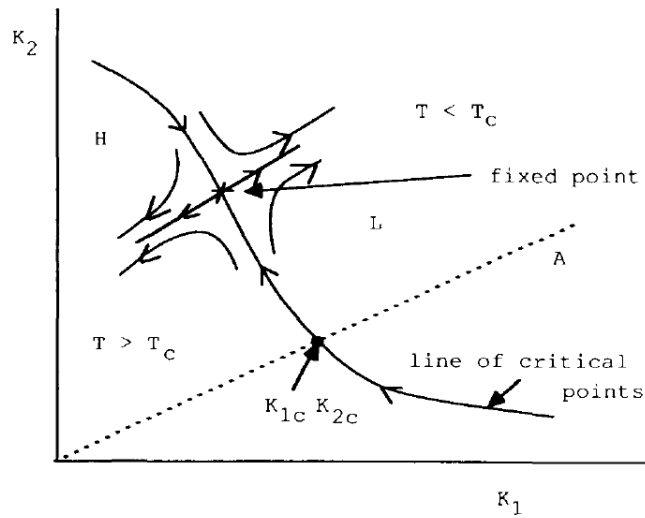
$$H = \sum_{\alpha=1}^n K_{\alpha} \psi_{\alpha}(\sigma_i) \longrightarrow \quad (4.41)$$

$$H' = \sum_{\alpha=1}^n K'_{\alpha} \psi_{\alpha}(\sigma_j) + Ng(\mathbf{K}) \quad (4.42)$$

Hvor  $\psi_1$  fx kunne være nærmeste naboer  $\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$ .

Ligesom vi så for en dimension, gælder det også generelt, at:

$$Z_{\text{System}} = \sum_{\text{Alle}} e^H = \sum_{\text{Alle tilbage}} e^{H' + Ng(\mathbf{k})} = e^{Ng(\mathbf{k})} Z_{\text{Renormaliseret system}} \quad (4.43)$$



Figur 4.3: Den stiplede linje er et system med fastholdt  $\frac{J_1}{J_2}$

### Fixed points

Vi forestiller os nu 2 dimensionale systemer, hvor der er vekselvirkning med både nærmeste nabo ( $J_1$ ) og næst-nærmeste nabo ( $J_2$ ). Vi forestiller os at de tilhørende værdier  $K_1$  og  $K_2$  har et kritisk punkt  $K_{1c}, K_{2c}$ , men der er flere kritiske punkter, hvilket vi kan se ved at iagttage systemer med et andet forhold mellem  $J_1$  og  $J_2$ . Se Figure 4.3.

Det gælder at et 'fixed point' opnået fra renormalisering ligger på denne linje. Grundet stabiliseringsegenskaberne ved fixed pointet, så vil vi altid enten bevæge os væk fra, eller hen mod dette. Det gælder at ved denne bevægelse, kan vi ikke krydse den kritiske linje. I sidste ende vi har vi 3 mulighed:

- Vi kan gå mod  $T = 0$ . I så fald vil vi være i en ordnet fase.
- Vi kan gå mod fixed point, hvilket vil betyde at vi er på den kritiske linje.
- Vi kan gå mod  $T = \infty$ , hvilket betyder at vi ikke er i en ordnet fase.

For d-dimensioner, forestiller vi os en kritisk overflade, renormalisering på denne overflade vil føre os mod et 'fixed point'.

### Relevante og irrelevante felter

I en model beskrivende et fysisk system, vil vores Hamilton-operator bestå af en række vekselvirkninger, vis bidrag bliver styret af ordensparameteren. Disse led kalder vi for felter.

Når man laver renormalisering gælder det om at konstruere en Hamilton-operator, der ligner den oprindelige, så man kan fortsætte med den samme operator i det uendelige. Ved denne process har man nogle gange behov for at indføre nye felter (som vi f.eks. gjorde i 2D Ising). Om disse felter er relevante

bestemmes af deres stabiliseringsegenskaber ved renormalisering. Går feltstyrken mod 'fixed point'-styrken ved renormalisering, betyder det at lige meget hvad styrken var da vi startede, vil vi makroskopisk set have samme system. Det er med andre ord irrelevant hvad vi startede med. Disse felter kalder vi irrelevante felter.

Går felterne derimod væk fra fixed point (som  $K$  i 2D-Ising) vil der være stor makroskopisk forskel på om vi starter på den ene eller anden side af fixed point, så disse felter er relevante. Ved disse betragtninger ses det at de relevante felter for 2D-ising er temperaturen og magnetfeltet og det er derfor udelukkende disse der bestemmer de kritiske eksponenter i renormaliseringsbilledet.



## Kapitel 5

# Stokastiske processer

### 5.1 Markov processer

Markov processer er navnet for processer, der udelukkende afhænger af hvilken tilstand systemet er i, og ikke dets forudgående historie. Sandsynligheden for at vores system er i tilstand specifik tilstand  $x$  er givet ved sandsynlighedsfordelingen  $P(x)$ , der må være normaliseret således at:

$$\int P(x)dx = 1 \quad (5.1)$$

(5.1) bliver naturligvis til en sum, hvis  $x$  antager diskrete værdier.

Raten (procent ændring pr. tid) af henfald fra tilstanden  $x$  til  $x'$  skriver vi som  $W_{xx'}$ . Vores sandsynlighedsfordelings tidsudvikling er styret af den såkaldte *master equation*:

$$\partial_t P(x, t) = \int dx' [W_{xx'}P(x', t) - W_{x'x}P(x, t)] \quad (5.2)$$

Begrebet om *detajeret balance* betyder at:

$$W_{xx'} = W_{x'x}e^{\beta(E_x - E_{x'})} \quad (5.3)$$

Hvilket betyder at sandsynlighedsfordelingen i fx. (5.2) vil ændre sig indtil ligevægt har indfundet sig. I ligevægt gælder det at:

$$W_{xx'}P(x', t)^{\text{eq}} = W_{x'x}P(x, t)^{\text{eq}} \quad (5.4)$$

Det vil sige, at der ikke løber nogen sandsynlighedsstrøm i (5.2).



## Kapitel 6

# Ude af ligevægt

Vi betragter nu et system der ikke er i ligevægt, men er så tæt på ligevægt, at det befinder sig i det *lineære regime*. Det betyder at forskydningen fra ligevægt er en lineære funktion af den perturbation  $\lambda(t)$ , der fører systemet ud af ligevægt. Hamilton-operatoren bliver for det perturberede system bliver:

$$H = H_0 + \lambda(t)A(x) \quad (6.1)$$

Vi laver nu en tilstand ude af ligevægt, dette gøres ved konstruktionen:

$$\lambda(t) = \begin{cases} \lambda_0 e^{\epsilon t} & t \leq 0 \\ 0 & \text{ellers} \end{cases} \quad (6.2)$$

Dette kan ses som en kraft der adiabatisk bliver anvendt på systemet, men det vigtigste er blot at vi til tiden  $t = 0$  har et system der er i ligevægt for  $H$ , men at vi til  $t > 0$  er ude af ligevægt i forhold til  $H_0$ .

Vi er som udgangspunkt interesseret i, hvordan et sådant system opfører sig, i forhold til dets ligevægtstilstand, da vi antager at tilstanden bevæger sig mod ligevægt. For en observabel  $B$  i systemet, definerer vi responsfunktionen:

$$\langle \delta B(t) \rangle = \langle B \rangle_t - \langle B \rangle_{eq} \quad (6.3)$$

Dvs. det er forskellen mellem middelværdien (taget over alle systemets tilstande) af  $B$  til tiden  $t$ . En anden væsentlig størrelse at kigge på er sammenhængen mellem perturbationen  $A$  og vores observabel  $B$ . Dette sammenhæng beskriver vi ved korrelationsfunktionen:

$$C_{BA}(t - t') = \langle \delta B(t) \delta A(t') \rangle_{eq} \quad (6.4)$$

Dette er nu vores redskaber til at kigge på systemer ude af ligevægts.

### 6.1 Onsager og fluktationer-dæmpning

Onsagers regressionshypotese siger, at korrelationen er proportional med responsfunktionen:

$$\langle \delta B(t) \rangle \propto C_{BA}(t) \quad (6.5)$$

Da vi forventer at  $B$  går imod en ligvægtsværdi for store tider, ser vi at også korrelationen mellem  $A$  og  $B$  går mod nul for store tider. Bemærk at denne relation også gælder for spontane fluktuationer, da systemet ikke kan se forskel på om der er tale om en spontan proces eller en udefrakommende indgriben. Udregnet for en delta-funktion, kan (6.5) vises at blive:

$$\langle \delta B(t) \rangle = \beta \lambda_0 C_{BA}(t) \quad (6.6)$$

## 6.2 Fluktationer og arbejde

Vi vil nu kigge på en stokastisk markov process (se kap. 5 for definition), hvor vi som bekendt har sandsynlighedsfordelingen

$$P_{eq}(x, \mu) = \frac{e^{-\beta H(x, \mu)}}{Z_\mu}. \quad (6.7)$$

Med  $t \in \{1, 2, 3, \dots\}$  så  $x(t)$  og  $\mu(t)$  defineret i samme skridt som  $t$ . Vi ved nu fra vores masterligning at sandsynligheder for, at være et givent sted til en given tid vil udvikle sig som

$$p(x, t+1) = \sum_{x'} W_{xx'}(\mu(t)) p(x', t). \quad (6.8)$$

Fra masterligningen har vi også, at ligevægtssandsynlighedsfordelingen er givet ved:

$$P_{eq}(x, \mu) = \sum_{x'} W_{xx'}(\mu) P_{eq}(x', \mu) \quad (6.9)$$

Vi ændre nu det kemiske potential, hvilket vil sige, at vi fører systemet ud af ligevægt. Dette resulterer i en energiændring

$$dE(\mu) = d\mathcal{W} + dQ, \quad (6.10)$$

hvor

$$d\mathcal{W} = \sum_x dH(x, \mu) P_{eq}(x, \mu(t)) \quad (6.11)$$

$$dQ = \sum_x H(x, \mu) dP_{eq}(x, \mu). \quad (6.12)$$

Vi har her valgt arbejdet til at være den energiændring der kommer som følge af, at energien ændrer sig, mens at varmen er givet ved ændring af ligevægtsbetingelsen, dvs. at energien vil flytte sig. Vi kan summe op i  $\tau$  tidsskridt og få det samlede arbejde og den samlede varmeændring:

$$\mathcal{W} = \sum_{t=0}^{\tau} \left( H(x(t+1), \mu(t+1)) - H(x(t+1), \mu(t)) \right) \quad (6.13)$$

$$Q = \sum_{t=0}^{\tau} \left( H(x(t+1), \mu(t)) - H(x(t), \mu(t)) \right) \quad (6.14)$$

Dermed bliver

$$\Delta E = W + Q \quad (6.15)$$

hvor energiændringen kun afhænger af start og sluttilstanden, mens at arbejde og varme også afhænger af vejen, præcis som vi også kender det fra klassiske termodynamiske processer.

### 6.3 Tidsinverterede veje

Vi vil nu kigge på det tidsinverterede tilfælde, dvs. vi har samme tidsintervaller som før, men vi tager nu den modsatte vej i  $(x, \mu)$ -rummet. Motivationen for dette er at vores intuition siger os, at spontane fluktationer må være reversible processer. Derfor vil vi gerne undersøge termodynamikkens 2. lov, for bevælgelser mod ligevægt, i et ikke ligevægts system. Lad derfor  $\hat{x}$  og  $\hat{\mu}$  beskrive den tidsinverterede veje. Det gælder nu, at

$$\hat{W}_{xx'}(\mu)P_{eq}(x', \mu) = W_{x'x}P_{eq}(x, \mu) \quad (6.16)$$

hvis der er detaljeret balance i systemet, gælder det også at

$$\hat{W}_{xx'} = W_{x'x} \quad (6.17)$$

Vi vil nu kigge på sandsynlighed for at vi har gået en bestemt vej. Dette gøres ved at summe sandsynlighederne op, så vi ender ud med at sandsynlighed for at have gået vejen  $\mathbf{x}$  er

$$\mathcal{P}(x) = W_{x(\tau)x(\tau-1)}(\mu(\tau)) \dots W_{x(1)x(0)}. \quad (6.18)$$

Gøres det samme for den tidsinverterede vej får vi, at

$$\hat{\mathcal{P}}(\hat{x}) = \mathcal{P}(x)e^{\beta Q(x)} \quad (6.19)$$

og med lidt teknisk snilde kan man omskrive dette til

$$\hat{\mathcal{P}}(\hat{x}) = \mathcal{P}(x)e^{-\beta(\mathcal{W}(x) - \delta F)} \quad (6.20)$$

hvor  $e^{\beta \Delta F} = \frac{Z_{\mu(0)}}{Z_{\mu(\tau)}}$ , hvilket er en ligevægtsstørrelse! Denne sammenhæng kaldes Crooks relation. Ud fra Crooks relation får man nemt Jarzynski's ligning, der er meget vigtig, da den forbinder arbejdet (som defineret i (7.13)) med forskellen i den frie energi, der kan bestemmes i ligevægt. Jarzynski's ligning fås ved at summe over alle veje i (7.20):

$$\langle e^{-\beta \mathcal{W}} \rangle = e^{-\beta \Delta F} \quad (6.21)$$

Vi har her taget gennemsnittet af alle veje fra  $x(0)$  til  $x(\tau)$ , hvor vi til tiden  $t = 0$  selvfølgelig startede i ligevægt, men til tiden  $\tau$  er vi ikke i ligevægt. Til gengæld er  $\Delta F$  energi-forskellen i ligevægtssystemet (eks.  $\lambda A(0)$  fra tidligere), så man kan med andre ord sige noget om det gennemsnitlige arbejde udført på system ud fra ligevægtsbetingelser. Vi kan nu prøve at sammenligne med termodynamikkens anden lov, der for konstant temperatur siger at  $\mathcal{W} \geq \Delta F$ , men i vores system er  $\Delta F$  konstant, så

$$\langle e^{-\beta \mathcal{W} + \beta \Delta F} \rangle = 1 \quad (6.22)$$

så lokalt set vil der være brud på termodynamikkens anden lov. Dette er dog ikke et problem da termodynamikkens anden lov udtaler sig om makroskopiske systemer i ligevægt, og fra Jensens ulighed ( $\langle e^X \rangle \geq e^{\langle X \rangle}$ ) får vi at

$$\langle \mathcal{W} \rangle \geq \Delta F \quad (6.23)$$

så i middel vil der ikke være overtrædelser af termodynamikkens anden lov, så vi er glade.