

## 5. Molekularfeldnäherung

- 1 5.1 Molekularfeldnäherung für das Ising Spin-1/2 System
- 2 5.2 Nicht-wechselwirkende Spins
- 3 5.3. Landau-Theorie
- 4 5.4 Ginzburg-Landau Theorie

# 5.1 Molekularfeldnäherung für das Ising Spin-1/2 System

gegeben:

- Ising Spin-1/2 System (d.h., mögliche Spineinstellungen  $s_i = \pm 1$ )
- $N$  Spins, Temperatur  $T$ , äußeres Feld  $H$ , Kopplungsstärke  $J$
- es wird nur die Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins berücksichtigt
- Dimension und Geometrie des Systems sind nicht spezifiziert

die **Hamilton-Funktion** des Systems ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i$$

die  $s_i$  bezeichnen die Spins an den Orten  $i$ , die Notation  $\langle \dots \rangle$  schränkt die Summe im **Mehrteilchenwechselwirkungsterm** auf nächste Nachbarn ein

die Summanden im ersten Term lassen sich folgendermaßen schreiben

$$s_i s_j = s_i \langle s_j \rangle + \langle s_i \rangle s_j - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle + (s_i - \langle s_i \rangle) (s_j - \langle s_j \rangle)$$

dabei sind die  $\langle s_i \rangle$  die **Ensemblemittelwerte** der Spineinstellungen  $s_i$   
 ist das System **translationsinvariant** (und gelten **periodische Randbedingungen**), dann gilt

$$\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = \langle s \rangle$$

somit erhält man

$$\begin{aligned} \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j &= \langle s \rangle \sum_{\langle i,j \rangle} s_i + \langle s \rangle \sum_{\langle i,j \rangle} s_j - \langle s \rangle^2 \sum_{\langle i,j \rangle} 1 + \\ &\quad \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i - \langle s_i \rangle) (s_j - \langle s_j \rangle) \end{aligned}$$

der letzte Termin, der die **Korrelationen zwischen zwei Spins** berücksichtigt, wird in der Folge **vernachlässigt** (**Molekularfeldnäherung**; 'mean field approximation')

somit erhält man die Hamilton-Funktion in der Molekularfeldnäherung,  $\mathcal{H}_{\text{MF}}$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{MF}} &= -Jz \langle s \rangle^2 \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N s_i + \frac{JN}{2} z \langle s \rangle^2 - H \sum_{i=1}^N s_i \\ &= -[Jz \langle s \rangle + H] \sum_{i=1}^N s_i + \frac{JN}{2} z \langle s \rangle^2 \end{aligned}$$

bzw. das **Molekularfeld**,  $H_{\text{MF}}$ ,

$$H_{\text{MF}} = JZ \langle s \rangle$$

$z$  gibt die Zahl der nächsten Nachbarn an; dieser Parameter berücksichtigt **teilweise** die Dimension und die Geometrie des Systems

**Berechnung der Thermodynamik** (in der MF-Näherung)

$$\begin{aligned} Z_N(H, T) &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp[-\beta \mathcal{H}_{\text{MF}}] = \cdots = \\ &= \exp[-\beta N J z \langle s \rangle^2 / 2] \{2 \cosh [\beta(H + H_{\text{MF}})]\}^N \end{aligned}$$

somit

$$G_N(H, T) = -k_B T \ln Z_N = \frac{1}{2} N J z \langle s \rangle^2 - k_B T N \ln \{2 \cosh [\beta(H + H_{\text{MF}})]\}$$

mit

$$G = \lim_{N \rightarrow \infty} G_N \quad \text{bzw.} \quad g = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{G_N}{N}$$

**Zustandsgleichung:**

(i)

$$M_N = - \left( \frac{\partial G_N}{\partial H} \right)_T = \cdots = N \tanh [\beta(H + H_{\text{MF}})]$$

(ii)

$$M_N = N \langle s \rangle = Nm \quad (\text{wobei } \langle s \rangle \rightarrow m)$$

also

$$m = \tanh [\beta(H + H_{\text{MF}})] = \tanh [\beta(H + Jzm)]$$

## Phasendiagramm, kritisches Verhalten, Thermodynamik:

- Phasendiagramm (bei  $H = 0$ )

Lösung der Gleichung

$$m = \tanh(\beta J z m)$$

kann nicht analytisch durchgeführt werden (daher z.B. graphische Lösung erforderlich)

es ergibt sich eine kritische Temperatur bei

$$k_B T_c = Jz$$

- Magnetisierung  $m$  bei  $T \sim T_c$

da  $m$  klein ist, gilt

$$m = \tanh(\beta J z m) = \tanh(T_c/T) \sim \frac{T_c}{T} m - \frac{1}{3} \left( \frac{T_c}{T} m \right)^3 + \dots$$

- $T > T_c$ : Lösung  $m = 0$
- $T < T_c$ : Lösungen:

(i)  $m = 0$

(ii), (iii)  $m = \pm \sqrt{3} \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1/2} = \pm \sqrt{3} (-\tau)^{1/2}$

Lösung (i) hat eine höhere Energie als Lösungen (ii) und (iii), daher:

$$m \sim \pm \sqrt{3} (-\tau)^{1/2} \sim (-\tau)^{1/2} \quad \beta = 1/2 \quad (\text{kritischer Exponent})$$

vergleiche van der Waals Gas: bei  $\tau \rightarrow 0$  war  $|\rho_{fl} - \rho_g| \sim (-\tau)^{1/2}$

- $H$  bei  $T \sim T_c$  (also  $\tau$  klein); weiters sei  $H$  klein  
somit folgt aus

$$m = \tanh \left[ \beta H + \frac{T_c}{T} m \right]$$

die Relation

$$\beta H \sim m\tau + \frac{1}{3}m^3$$

bzw. bei  $\tau \rightarrow 0$

$$H \sim m^3 \quad \delta = 3$$

vergleiche van der Waals-Gas: bei  $\tau \rightarrow 0$  war  $\pi \sim \omega^3$

- isotherme Suszeptibilität  $\chi_T$  bei  $T \sim T_c$

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T \sim \left( \frac{\partial m}{\partial H} \right)_T$$

mit Hilfe obiger Relation für  $H$  folgt:

$$\frac{\partial}{\partial H} \left( \frac{H}{k_B T_c} \right) \sim \frac{\partial}{\partial H} \left( \tau m + \frac{1}{3} m^3 + \dots \right)$$

$$\frac{1}{k_B T_c} \sim \tau \chi_T + m^2 \chi_T \quad \text{also} \quad \chi_T \sim \frac{1}{k_B T_c} \frac{1}{\tau + m^2}$$

- $T > T_c$ :

$$\chi_T \sim \frac{1}{k_B T_c} \frac{1}{\tau + 0} \sim \frac{1}{k_B} \frac{1}{1(T - T_c)^1}$$

- $T < T_c$ :

$$\chi_T \sim \frac{1}{k_B T_c} \left[ \frac{T - T_c}{T_c} + 3 \underbrace{\left( -\frac{T - T_c}{T_c} \right)}_{\text{da } m^2 \sim -3\tau} \right]^{-1} = \frac{1}{k_B} \frac{1}{2(T_c - T)^1}$$

kritische Exponenten  $\gamma = \gamma' = 1$ ; Verhältnis der Vorfaktoren 1:2  
 vergleiche van der Waals-Gas: bei  $\tau \rightarrow 0$  war  $\kappa_T \sim (-\tau)^{-1}$

- thermodynamische Potentiale

$$\begin{aligned} g(H, T) &= \frac{G_N(H, T)}{N} = \frac{1}{2} J z m^2 - k_B T \ln \left[ 2 \cosh \left[ \underbrace{\beta(H + J z m)}_{\beta H T_c / T m} \right] \right] = \dots = \\ &= \frac{1}{2} J z m^2 - k_B T \ln 2 + \frac{k_B T}{2} \ln(1 - m^2) \end{aligned}$$

Legendre-Transformation von  $G$  auf  $A$  (bzw. von  $g$  auf  $a$ )

$$\begin{aligned}
 a(M, T) &= \frac{A_N(M, T)}{N} = \frac{1}{N} [G_N(H, T) + HM] = g(H, T) + Hm \\
 &= \frac{1}{2} \underbrace{Jz}_{k_B T_c} m^2 - k_B T \ln 2 + \frac{k_B T}{2} \ln(1 - m^2) \\
 &\quad + m \left[ -k_B T_c m + \frac{k_B T}{2} \ln \left( \frac{1+m}{1-m} \right) \right]
 \end{aligned}$$

der letzte Term entspricht  $H$ ; man erhält ihn, indem man die Zustandsgleichung nach  $H$  auflöst

somit

$$a(M, T) = -\frac{1}{2} k_B T_c m^2 - \underbrace{k_B T \ln 2}_{(i)} + \underbrace{k_B T \frac{1}{2} \ln(1 - m^2)}_{(ii)} + \underbrace{\frac{k_B T}{2} m \ln \left( \frac{1 - m}{1 + m} \right)}_{(ii)}$$

(i) konstanter,  $m$ -unabhängiger Term

(ii) Terme werden für kleine  $m$  entwickelt

schließlich erhält man

$$a(M, T) + k_B T \ln 2 \sim \frac{1}{2} k_B (T - T_c) m^2 + \underbrace{k_B T m^4}_{\text{...}} \frac{1}{12} + \dots$$

## 5.2 Nicht-wechselwirkende Spins

Sei die Hamilton-Funktion des Systems ( $N$  Spins  $\mathbf{S}_i$ , äußeres Feld  $\mathbf{H}$ ) gegeben durch

$$\mathcal{H} = -g\mu_B \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \mathbf{H}$$

Bemerkungen:

- $g$  ist der gyromagnetische Faktor,  $\mu_B$  ist das Bohr-Magneton
- das Skalarprodukt  $\mathbf{S}_i \mathbf{H}$  kann die Werte  $m_i H$  annehmen, wobei  $m_i = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$
- die  $\mathbf{S}_i$  werden oft durch die  $\mathbf{J}_i$  (Bahndrehimpulse) ersetzt

dann ist

$$Z_N(\mathbf{H}, T) = \sum_{m_1=-S}^S \cdots \sum_{m_N=-S}^S \exp \left[ \beta H g \mu_B \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \mathbf{H} \right] = \cdots = \left\{ \frac{\sinh \left[ \left( S + \frac{1}{2} \right) \beta g \mu_B H \right]}{\sinh \left[ \frac{1}{2} \beta g \mu_B H \right]} \right\}^N$$

Bemerkung:

für  $S = 1/2$  geht diese Formel in

$$Z_N(\mathbf{H}, T) = [2 \cosh(\beta g \mu_B H/2)]^N$$

über

daher:

$$G_N(H, T) = -k_B T \ln Z_N = -k_B TN \ln \left\{ \frac{\sinh \left[ \left( S + \frac{1}{2} \right) \beta g \mu_B H \right]}{\sinh \left[ \frac{1}{2} \beta g \mu_B H \right]} \right\}$$

$$M_N(H, T) = - \left( \frac{\partial G}{\partial H} \right)_T = N k_B T \frac{\partial}{\partial H} \ln Z_N = N S g \mu_B B_S(\beta S g \mu_B H)$$

wobei

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

$$B_{1/2} = \tanh \left( \frac{x}{2} \right)$$

die Brillouin-Funktion ist; sie geht für  $S \rightarrow \infty$  in die Langevin-Funktion über

## 5.3 Landau-Theorie

### Grundlagen

#### Annahme:

Entwicklung der thermodynamischen Potentiale in Potenzreihen nahe dem kritischen Punkt (dort ist der Ordnungsparameter  $M$  klein und die Abweichung der Temperatur  $T$  von der kritischen Temperatur  $T_c$  klein)

#### Ansatz:

Taylor-Entwicklung des thermodynamischen Potentials in Potenzen des Ordnungsparameters, unter Ausnützung der Symmetrie

$$A(M, T) \sim A_0(T) + A_2(T)M^2 + A_4(T)M^4 + A_6(T)M^6 + \dots$$

wobei die Koeffizienten  $A_i(T)$  ebenfalls in Taylor-Reihen bezüglich der Temperatur entwickelt werden:

$$A_2(T) \sim A_{2,0} + A_{2,1}(T - T_c) + \dots \quad A_4(T) \sim A_{4,0} + A_{4,1}(T - T_c) + \dots$$

mit

$$H = \left( \frac{\partial A}{\partial M} \right)_T = (2A_2 + 4A_4 M^2 + \dots) M$$

$$(\chi_T)^{-1} = \left( \frac{\partial^2 A}{\partial M^2} \right)_T = 2A_2 + 12A_4 M^2 + \dots$$

da in der Nähe des kritischen Punktes (also bei  $T \rightarrow T_c$ )  $\chi_T$  divergiert, d.h.

$$\lim_{T \rightarrow T_c} (\chi_T)^{-1} = 0$$

folgt  $A_2(T_c) = A_{2,0} = 0$

somit ist die Suszeptibilität in der Nähe des kritischen Punktes gegeben durch

$$(\chi_T)^{-1} \sim 2A_{2,1}(T - T_c) + 12[A_{4,0} + A_{4,1}(T - T_c) + \dots] M^2 + \dots$$

Krümmung von  $A(M, T)$ :

Phasenübergang 1. Ordnung

Doppeltangente (vgl. Maxwell-Konstruktion)

Phasenübergang 2. Ordnung



## Kritisches Verhalten des Landau-Modells:

(a)  $M$  für  $H = 0$ ist  $T < T_c$ , dann ist  $M \neq 0$ ; da  $H = 0$ , folgt aus obiger Relation für  $H$ 

$$M^2 \sim \left( -\frac{A_2}{A_4} \right) \sim -\frac{A_{2,1}(T - T_c)}{2A_{4,0}} \quad \text{bzw.} \quad M \sim \sqrt{\frac{A_{2,1}}{2A_{4,0}}} (-\tau)^{1/2}$$

wobei  $\beta = 1/2$  jener kritische Exponent ist, der angibt, wie der Ordnungsparameter in der Nähe des kritischen Punktes verschwindet(b) Suszeptibilität  $\chi_T$  in der Nähe des kritischen Punktes

- $T > T_c$ : hier ist  $M = 0$

$$(\chi_T)^{-1} \sim 2A_2 \sim 2A_{2,1}(T - T_c) + \dots \quad \text{bzw.} \quad \chi_T \sim \tau^{-1}$$

wobei  $\gamma = 1$  jener kritische Exponent ist, der angibt, wie die Suszeptibilität **oberhalb** der kritischen Temperatur divergiert

- $T < T_c$ : hier ist  $M \neq 0$   
wegen  $M \sim \sqrt{A_{2,1}/2A_{4,0}}(T_c - T)^{1/2}$  gilt

$$(\chi_T)^{-1} \sim 2A_{2,1}(T - T_c) + 12(A_{4,0} + \dots) \underbrace{M^2}_{\frac{A_{2,1}}{2A_{4,0}}(T_c - T)} + \dots$$

somit gilt

$$(\chi_T)^{-1} \sim 4A_{2,1}(T - T_c) + \dots \quad \text{bzw.} \quad \chi_T \sim (-\tau)^{-1}$$

wobei  $\gamma' = 1$  jener kritische Exponent ist, der angibt, wie die Suszeptibilität **unterhalb** der kritischen Temperatur divergiert

(c) Abhängigkeit von  $H$  und  $M$  in der Nähe des kritischen Punktes

$$\begin{aligned} H &= \left( \frac{\partial A}{\partial M} \right)_T = \\ &= \left[ 2A_2 + 4A_4 M^2 + \dots \right] M \sim \left[ 2A_{2,1}(T - T_c) + 4A_{4,0} M^2 + \dots \right] M \\ &\quad \text{bzw.} \quad \lim_{T \rightarrow T_c} H = M^3 \end{aligned}$$

wobei  $\delta = 3$  jener kritische Exponent ist, der einen Zusammenhang zwischen der Magnetisierung  $M$  und dem Feld  $H$  in der Nähe des kritischen Punktes herstellt

### Kritikpunkte der Landau-Theorie:

- divergente Beiträge zur Entwicklung  
z.B. Ising-Modell in 2D,  $H = 0$ :

$$A(H = 0, T) \sim A(0, T_c) + a(T - T_c) + b(T - T_c)^2 \ln(T - T_c) + \dots$$

- die kritischen Exponenten des Landau-Modells sind die s.g. **klassischen** kritischen Exponenten; sie sind also falsch

### Positive Aspekte der Landau-Theorie:

- setzt man zum Beispiel  $A_{4,0} = 0$  aber  $A_{6,0} \neq 0$ , dann erhält man für die kritischen Exponenten

$$\beta = 1/4 \quad \delta = 5 \quad \gamma = \gamma' = 1$$

damit kann Trikritikalität beschrieben werden

- 'Manipulation' von kritischen Exponenten

Verallgemeinerung der Relation

$$A_2(T) = \underbrace{A_{2,0}}_{=0} + A_{2,1}(T - T_c)^{1(=\gamma')} + \dots$$

führt zu

$$\bar{A}_2(T) = \bar{A}_{2,1}(T - T_c)^{\gamma'} + \dots$$

wobei der Wert von  $\gamma'$  noch nicht spezifiziert ist und, zum Beispiel, an ein Modell angepasst werden kann; dann folgt (ohne Beweis)

$$\chi_T^{-1} = 2A_{2,1}|T - T_c|^{\gamma'} \quad M = \sqrt{\frac{A_{2,1}}{2A_{4,0}}}|T - T_c|^{\gamma'/2}$$

also  $\beta = \gamma'/2$  und  $\delta = 3$

- die Relation

$$\begin{aligned} H &= \left( \frac{\partial A}{\partial M} \right)_T = 2A_{2,1}(T - T_c)M + 4A_{4,0}M^3 + \dots \\ &= (2A_{2,1}T_c)TM + 4A_{4,0}M^3 \end{aligned}$$

verknüpft  $\tau$ ,  $H$ , und  $M$ ; durch Division dieser Gleichung durch  $|\tau|^{3/2}$  folgt

$$\frac{H}{|\tau|^{3/2}} = \pm(2A_{2,1}T_c) \frac{M}{|\tau|^{1/2}} + 4A_{4,0} \left( \frac{M}{|\tau|^{1/2}} \right)^3$$

diese Relation verknüpft die Skalenvariablen ('scaling variables')

$$\tilde{H} = \frac{H}{|\tau|^{3/2}} \quad \tilde{M} = \frac{M}{|\tau|^{1/2}}$$

somit hat die Zustandsgleichung in diesen Skalenvariablen folgende Gestalt

$$\tilde{H} = \pm\alpha\tilde{M} + \beta\tilde{M}^3$$

es tritt also kein  $\tau$  (und somit keine Temperatur) mehr auf

**Frage:** wie verhalten sich  $\tilde{H}$  und  $\tilde{M}$  wenn  $\tau \rightarrow 0$

**Antwort:** Skalenhypothese von Widom (Kapitel 7)

## 5.4 Ginzburg-Landau Theorie

### Bemerkungen:

- phänomenologische Theorie, die mit makro- und mesoskopischen Größen arbeitet und mikroskopische Größen vermeidet
- soll in der Nähe des kritischen Punktes gültig sein: daher sind  $\tau \sim (T - T_c)$  und der Ordnungsparameter klein
- sie stellt einen intuitiven Zugang dar

### Beispiel: Ising Modell

$$s_i \rightarrow m(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_c a_0^d} \sum_i g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) s_i$$

wobei  $m(\mathbf{r})$  die lokale Magnetisierung und  $g(\mathbf{x})$  eine geeignete Mittelungsfunktion ist

- $a_0 \dots$  Gitterkonstante
- $a_x \dots$  lineare Abmessung der Mittelungszelle
- $L \dots$  makroskopische Dimension des Systems mit  $a_0 \ll a_x \ll L$
- $d \dots$  Dimension des Systems
- $N_c \dots$  Zahl der Spins in der Mittelungszelle

## Folgen:

- alle Fluktuationen mit Wellenlängen kleiner als  $a_x$  werden unterdrückt
- **Fourier-Komponenten** mit Wellenzahlen größer als  $\Lambda \sim 1/a_x$  werden **nicht berücksichtigt**

**Ginzburg-Landau Funktional:** an Stelle von

$$\begin{aligned} A(M, T) &= A_0(T) + A_2(T)M^2 + A_4(T)M^4 + \dots \\ G(H, T) &= A_0(T) + A_2(T)M^2 + A_4(T)M^4 + \dots - HM \end{aligned}$$

verwendet man nunmehr folgenden **Ansatz** [unter Annahme der Symmetrie  $m(\mathbf{x}) \rightarrow -m(\mathbf{x})$ ] für das **Ginzburg-Landau Funktional**  $\mathcal{F}[m]$

$$\mathcal{F}[m] = \int \underbrace{d^d x}_{dx} \left[ a(T)m^2(\mathbf{x}) + \frac{b}{2}m^4(\mathbf{x}) + \dots + c[\nabla m(\mathbf{x})]^2 + \dots - H(\mathbf{x})m(\mathbf{x}) \right]$$

mit  $a(T) = a'(T - T_c)$  (vgl. Landau-Theorie)

weilers gilt dann:

- $$Q(H, T) \propto \int \mathcal{D}[m] \exp \{-\beta \mathcal{F}[m]\}$$

$$G(H, T) = -k_B T \ln Q(H, T)$$

## Bemerkungen:

- $\mathcal{D}[m]$  bezeichnet die **funktionale Integration**
- eine Verallgemeinerung des Konzepts von  $m(\mathbf{x})$  ( $\in \mathbb{R}$ ; entspricht z.B. dem Ising-Modell) auf  $\mathbf{m}(\mathbf{x})$  ( $\in \mathbb{R}^d$ ; entspricht z.B. dem Heisenberg-Modell) ist möglich
- die Form des Ginzburg-Landau Funktionals ist sehr allgemein; es läßt sich für verschiedene Formen von Phasenübergängen aufstellen
- keine mikroskopische Herleitung notwendig

## Möglichkeiten der Auswertung des Funktionals:

(a) **Ginzburg-Landau Näherung**

die wahrscheinlichste Konfiguration von  $m(\mathbf{x})$  ist durch den 'stationären' Zustand gegeben, also 'bei'

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta m}(\mathbf{x}) = 2 \left[ a + bm^2(\mathbf{x}) - c\nabla^2 \right] m(\mathbf{x}) - H(\mathbf{x}) = 0$$

wobei das Minus im Gradiententerm durch den Oberflächenterm zustande kommt im Funktionalintegral wird dann der Integrand durch jenes  $m(\mathbf{x})$  ersetzt, das dem 'statischen' Zustand entspricht

## (b) Gauß-Näherung

Annahmen:

- im Fuktional werden alle Terme bis zur zweiten Ordnung in  $m(\mathbf{x})$  berücksichtigt; daher muß  $a > 0$  bzw.  $\tau > 0$  sein
- $H = 0$

$m(\mathbf{x})$  wird in Fourier-Komponenten zerlegt ('BZ' bezeichnet die Brillouin-Zone)

$$m(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} m_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad m_{\mathbf{k}}^* = -m_{\mathbf{k}}$$

dann ist

$$\int d\mathbf{x} m^2(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} a m_{\mathbf{k}} m_{-\mathbf{k}}$$

$$\int d\mathbf{x} c [\nabla m(\mathbf{x})]^2 = \sum_{\mathbf{k}} c k^2 m_{\mathbf{k}} m_{-\mathbf{k}}$$

somit erhält man für  $\mathcal{F}[m]$ 

$$\mathcal{F}[m] = \int d\mathbf{x} \left[ a m^2(\mathbf{x}) + c [\nabla m(\mathbf{x})]^2 \right] = \sum_{\mathbf{k}} (a + ck^2) m_{\mathbf{k}} m_{-\mathbf{k}}$$

ist  $L$  groß, dann kann man den **Kontinuumslimit** durchführen (mit  $\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}$ )

$$\begin{aligned} m(\mathbf{x}) &= \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} m_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \quad \rightarrow \quad m(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} m_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \\ &\quad \rightarrow \quad \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} d\mathbf{k} m_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}) \end{aligned}$$

wobei  $\Lambda$  der **Radius der Brillouin-Kugel** ist

daher läßt sich die **funktionale Integration** durch eine **Integration über die Fourier-Komponenten  $m_{\mathbf{k}}$**  ersetzen

$$\int \mathcal{D}[m] \cdots \quad \rightarrow \quad \prod_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \int dm_{\mathbf{k}} \cdots$$

wobei die  $m_{\mathbf{k}} \in \mathbb{C}$

für die **Zustandssumme  $Q(H=0, T)$**  ergibt sich somit

$$Q(H=0, T) = \int \mathcal{D}[m] \exp\{-\beta\mathcal{F}[m]\} = \prod_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \int dm_{\mathbf{k}} \underbrace{\exp\{-\beta\mathcal{F}[m]\}}_{\prod_{\mathbf{k}} \exp[-\beta(a+ck^2)m_{\mathbf{k}}m_{-\mathbf{k}}]}$$

hält man  $k$  fest, so gilt (für den allgemeinen Fall, daß  $\mathbf{m}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n$ )

$$\int d\mathbf{m}_{\mathbf{k}} \exp[-\beta(a+ck^2)\mathbf{m}_{\mathbf{k}}\mathbf{m}_{-\mathbf{k}}] = \cdots \propto \left( \sqrt{\frac{\pi}{\beta(a+ck^2)}} \right)^n$$

insgesamt erhält man:

$$Q(H=0, T) \propto \prod_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \left[ \frac{\pi}{\beta(a + ck^2)} \right]^{n/2}$$

$$G(H=0, T) = G_0 - k_B T \frac{n}{2} \sum_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \ln \left[ \frac{\pi}{\beta(a + ck^2)} \right]$$

Berechnung der spezifischen Wärme (in  $d$  Dimensionen)

$$c_{H=0} = \frac{C_{H=0}}{V} = -T \left( \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_{H=0} \frac{1}{L^d} = \dots = k_B \frac{n}{2} (Ta')^2 \frac{1}{L^d} \sum_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{1}{(a + ck^2)^2} + \dots$$

$$\underbrace{\quad}_{L \text{ gross}} \rightarrow k_B \frac{n}{2} (Ta')^2 \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(a + ck^2)^2} + \dots$$

nun wird die **Korrelationslänge**  $\xi$  über

$$\xi = \sqrt{\frac{c}{a}} = \sqrt{\frac{c}{a'}} \frac{1}{(T - T_c)^{1/2}}$$

eingeführt, die offensichtlich **bei  $T = T_c$  divergiert**

mit  $q = k\xi$  erhält man dann

$$\begin{aligned}
 c_{H=0} &= k_B \frac{n}{2} (Ta')^2 \int_{q < \Lambda\xi} d\mathbf{q} \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{1}{\xi^d} \frac{1}{(1+q^2)^2} \underbrace{\frac{1}{a^2}}_{\frac{\xi^4}{c^2}} \\
 &= \xi^{4-d} \left[ k_B \frac{n}{2} \left( \frac{Ta'}{c} \right)^2 \int_{q < \Lambda\xi} d\mathbf{q} \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{1}{(1+q^2)^2} \right] \\
 &\propto \xi^{4-d} A
 \end{aligned}$$

wobei sowohl  $\xi$  als auch die **Amplitude**  $A$  bei  $T_c$  divergieren können

in der Folge werden Integrale der Form

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} f(q^2) = \int \underbrace{\frac{d\Omega_d}{(2\pi)^d}}_{[2^{(d-1)}\pi^{d/2}\Gamma(d/2)]^{-1}} \int dq q^{d-1} f(q^2)$$

für verschiedene **Dimensionen**  $d$  betrachtet, wobei wir nur an einem möglichen singulären Verhalten der Integrale interessiert sind

(a)  $d < 4$ 

$$\int_0^{\Lambda\xi} dq q^{d-1} \frac{1}{(1+q^2)^2} = \dots = \text{endl.} + \mathcal{O}(\Lambda\xi)^{d-4}$$

das Integral konvergiert für  $\Lambda \rightarrow \infty$ (b)  $d = 4$ 

$$\int_0^{\Lambda\xi} dq q^3 \frac{1}{(1+q^2)^2} = \dots \sim \ln \Lambda\xi$$

das Integral divergiert für  $\Lambda \rightarrow \infty$ (c)  $d > 4$ 

$$\int_0^{\Lambda\xi} dq q^{d-1} \frac{1}{(1+q^2)^2} = \dots = -A_1 + A_2(\Lambda\xi)^{d-4}$$

das Ergebnis des Integrals zeigt Potenzverhalten in  $\Lambda$  für  $\Lambda \rightarrow \infty$

schließlich erhält man mit  $c_{H=0} = \xi^{4-d} A$

$$c_{H=0}^{\text{sing}} \sim \begin{cases} \xi^{4-d} A = A(T - T_C)^{-\frac{4-d}{2}} & \text{divergent} \quad d < 4 \\ 1 \cdot \ln(\Lambda\xi) \sim \ln(T - T_C) & d = 4 \\ \xi^{4-d} [-A_1 + A_2(\Lambda\xi)^{d-4}] \sim A_2 + A_1(T - T_C)^{\frac{d-4}{2}} & \text{'cusp'} \quad d > 4 \end{cases}$$