Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Die Theorie der Phasenübergänge ist ein fundamentaler Zweig der statistischen Physik, die einen erheblichen Fortschritt in den letzten 30 Jahren gemacht hat und den Zugang zu vielen neuen Forschungsgebieten ermöglichte.
Das Ziel dieser Arbeit ist nicht, eine vollständige Einführung in dieses Gebiet zu geben, aber zumindest die zugrundeliegenden Prinzipien zu veranschaulichen.
Es existiert eine große Anzahl von Modellen in der statistischen Mechanik, die das Phänomen der Phasenübergänge erklären können. Vor allem lassen sich die meisten zweidimensionalen Modelle exakt lösen; es sind nur wenige dreidimensionale Beispiele bekannt. Das erste solche Modell war das zweidimensionale Ising-Modell, das durch Onsager 1944 gelöst wurde. Obwohl es die Physik realer Systeme stark vereinfacht, so beschreibt es doch die allgemeinen Merkmale vieler Phänomene.
Dann brauchte man zwei Jahrzehnte, um zu erkennen, daß zwei wichtige Bestandteile des Ising-Modells - die 'star-triangle'-Relation (STR) und die sich ergebende Kommutativität der Transfer-Matrizen - benutzt werden können, um andere zweidimensionale Modelle zu lösen.
Ein anderes oft zitiertes Modell ist das Potts-Modell. Das q-Zustands-Potts-Modell, die Verallgemeinerung des Ising-Modells von zwei auf q Spineinstellungen, ist eines der am sorgfältigsten untersuchten Modelle in der statistischen Physik. Da viele interessante Größen dieses Modells exakt bekannt sind, dient das Potts-Modell immer wieder als wichtiges Versuchsmodell, um allgemeine Konzepte wie Finite-Size-Scaling, die Form der Energie- und Magnetisierungsverteilung, oder die Nullstellenbestimmung der Zustandssumme zu untersuchen, wie die Referenzen auf jüngste Beispiele zeigen. Viele der exakt bekannten Ergebnisse haben auch faszinierende algebraische Interpretationen, wie kürzlich in einem Review zur Knotentheorie und statistischen Physik aufgezeigt wurde.
Neben dem theoretischen Interesse, verdient das Potts-Modell wegen der vielen experimentellen Realisationen aber auch eigenständige Aufmerksamkeit. Es ist bekannt, daß das Ising-Modell magnetische Substanzen gut beschreiben kann. Das q-Zustands-Potts-Modell hat aber eine noch reichere und allgemeinere Struktur, mit der man auch komplizierte magnetische und strukturelle Eigenschaften, wie zum Beispiel inkommensurable Phasen, in zwei oder drei Dimensionen modellieren kann. Besonders für den Fall $q = 3$ sind solche Realisationen schon länger bekannt.
Die Eigenschaften des Modells, die Ordnung des Phasenübergang durch die Anzahl der Spineinstellungen bei vorgegebener Raumdimension regulieren zu können, macht es zu einem der wichtigsten theoretischen Modelle. Neben dem Studium kritischer Phänomene erlaubt es das Studium von Phasenübergängen erster Ordnung, die eine wichtige Rolle in vielen physikalischen Systemen spielen.
Beispiele reichen von verschiedenen Entwicklungsstadien des frühen Universum über den "Deconfinement"-Übergang im Quark-Gluon System bis hin zu zahlreichen Phasenübergängen in kondensierter Materie wie etwa gewöhnliches Schmelzen. Die vor-

liegende Arbeit beschäftigt sich vorwiegend mit dem zweidimensionalen 3-Zustands-Potts-Modell, was äquivalent zu einem Z_3 symmetrischen Modell ist.

2 Phasenübergänge

2.1 Definition einer Phase

Aus der Erfahrung weiß man, daß eine Substanz in verschiedenen Formen auftreten kann. Die bekanntesten dieser Formen sind die Aggregatzustände: fest, flüssig und gasförmig. Man weiß aber auch weiterhin, daß ein Stoff, der sich in einem bestimmten Aggregatzustand befindet, in verschiedenen Modifikationen vorliegen kann. So kann, z. B. fester Schwefel unkristallisiert, d. h. amorph sein (isotroper Aggregatzustand), er kann aber auch in zwei verschiedenen Kristallformen - rhombisch oder monoklin kristallisiert - vorkommen (anisotroper Aggregatzustand). Ein anderer Stoff, der im festen Zustand in verschiedenen Modifikationen auftreten kann, ist der Kohlenstoff: in amorpher Form erscheint er als Ruß, in kristalliner Form als hexagonales Graphit oder als kubischer Diamant oder gar als Fullerene.
Man nennt nun die einzelnen Aggregatzustände und die verschiedenen Modifikationen, in denen ein Stoff vorkommen kann, in der Thermodynamik nach einem Vorschlag von Gibbs eine *Phase* [1]. Die folgende Tabelle gibt einen Überblick über die wichtigsten in der Natur vorkommenden Aggregatzustände und Phasen. In vie-

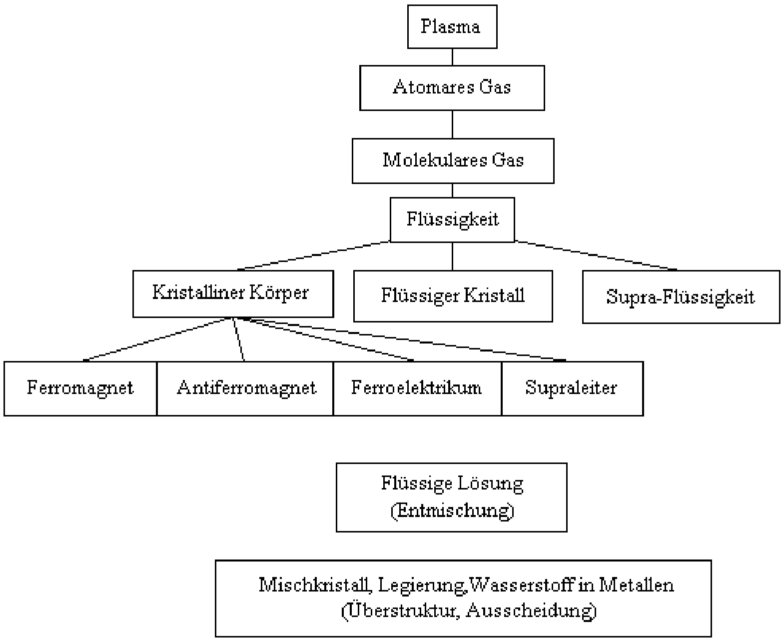

Abbildung 1: In der Natur vorkommende Phasen [1]

[1]Die Bezeichnung Phase stammt aus dem Griechischen, in welcher Sprache das Wort ‘Phainomai’ auf deutsch ‘ich erscheine’ heißt.

len Systemen wird bei der Änderung gewisser Variablen wie die Temperatur T, der Druck p, das Magnetfeld H der Stoff von einer Phase in eine andere Phase überführt. Solch einen Vorgang nennt man einen *Phasenübergang.*

2.2 Koexistenz zweier Phasen

Unter bestimmten Bedingungen (z. B. bei einer bestimmten Temperatur, einem bestimmten Druck oder magnetischen Feld) haben die Eigenschaften eines Stoffes (wie seine Dichte, seine Entropie und sein magnetisches Moment etc.) einheitliche Werte. Aber in gewissen Situationen, können einige Eigenschaften nicht den gleichen Wert haben, sondern sie können zwei oder mehrere verschiedene Werte annehmen. Zum Beispiel kann Wasser bei einer Temperatur von $100°C$ und bei einem Druck von einer Atmosphäre entweder gasförmig (geringe Dichte) oder flüssig (hohe Dichte) erscheinen. Das magnetische Moment eines Magneten, der sich nicht in einem Magnetfeld befindet, ist nicht eindeutig und kann in jede Richtung zeigen.
Es gibt also bestimmte Situationen, in denen Dampf und Wasser gleichzeitig existieren können, oder in denen die eine Hälfte der Spins eines Magneten 'nach oben' und die andere Hälfte 'nach unten' zeigen können. Dieses Phänomen wird Phasengleichgewicht genannt. Für die Koexistenz zweier Phasen müssen gewisse thermodynamische Bedingungen erfüllt sein, die jetzt kurz erläutert werden sollen.
Als Beispiel betrachte man einen geschlossenen Behälter, indem sich Wasser und Dampf befinden. Das Wasser-Dampf-Gemisch ist nicht homogen, weil die Dichten von Wasser und Gas verschieden sind. Aber es sind jeweils die Gasphase und die flüssige Phase homogen. Deshalb kann man sich die koexistierenden Phasen als ein zweikomponentiges System vorstellen, in dem sich die Kompenenten, Wasser und Dampf, im Gleichgewicht befinden. D. h. die Temperatur und der Druck muß für beide Komponenten gleich sein. Da sich die Moleküle von einer Systemkomponente zur anderen Systemkompenente frei bewegen können, muß das chemische Potential von Wasser und das von Dampf im Gleichgewicht gleich sein: $\mu_{\text{Wasser}}(T,p) = \mu_{\text{Dampf}}(T,p)$. Abbildung 2 zeigt den Verlauf einer Isotherme eines Flüssigkeit-Gas-Gemischs bei einer bestimmten Temperatur. Für Volumina kleiner als V_1 existiert nur die flüssige Phase; für Volumina größer als V_2 existiert nur die Gasphase. Zwischen V_1 und V_2 existieren die Phasen nebeneinander und das System befindet sich im stabi-

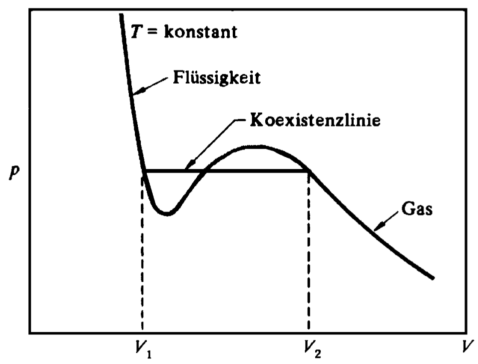

Abbildung 2: $(p - V)$-Diagramm eines Flüssigkeit-Gas-Gemischs (schematisch) [2]

len Gleichgewicht. Die Volumenanteile der flüssigen und gasförmigen Phase müssen so beschaffen sein, daß die Summe der Volumina gleich dem verfügbaren Volumen V ist.
Eine weitere wichtige Schlußfolgerung betrifft die Zahl f der Freiheitsgerade, d. h. die Zahl der unabhängigen Variablen, die durch die *Gibbssche Phasenregel* ausgedrückt werden kann:

$$f = 2 + \alpha - \pi\,, \tag{2.1}$$

mit α = Anzahl der Komponenten einer Phase, π= Anzahl der Phasen. Die einzigartige Bedeutung dieser Regel wird am Phasendiagramm von Wasser klar. Wenn drei Phasen gleichzeitig existieren, gibt es keinen freien Parameter. Der Punkt, Tripelpunkt genannt, an dem drei Phasen gleichzeitig existieren, ist somit eindeutig bestimmt. Die Trennungslinie zwischen festem und gasförmigen Zustand endet im Tripelpunkt. Während die Trennungslinie zwischen der festen und der flüssigen Phase bis zu höchsten Drücken existiert, endet die zwischen flüssiger und gasförmiger Phase im sogenannten kritischen Punkt.

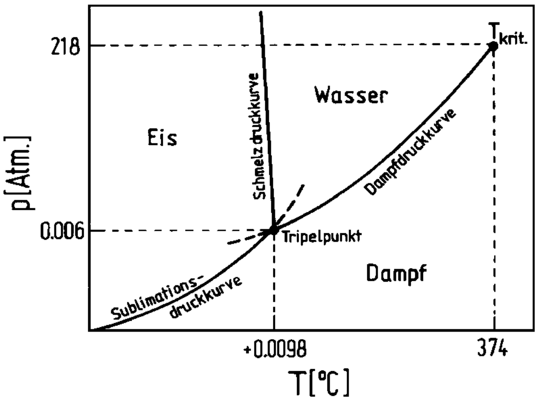

Abbildung 3: Phasendiagramm des Wassers [3]

2.3 Der kritische Punkt

Das in Abbildung 4a) dargestellte $(p{-}T)$-Diagramm zeigt eine Kurve für das Phasengleichgewicht. Der Punkt an dem sie endet, wird *kritischer Punkt* genannt, und die ihm entsprechende Temperatur und Druck *kritische Temperatur* T_C und *kritischer Druck* p_C. Der kritische Punkt zeichnet sich dadurch aus, daß bei Temperaturen oberhalb der kritischen Temperatur und bei Drücken größer als der kritische Druck, keine verschiedenen Phasen gleichzeitig existieren können und, daß das betrachtete System immer homogen ist. Das $(p - V)$-Diagramm in Abbildung 4b) zeigt den Verlauf der Isothermen bei Annäherung an die kritische Temperatur. In diesem Fall nähern sich die spezifischen Volumina der miteinander im Gleichgewicht befindlichen Phasen und fallen im kritischen Punkt zusammen. Die in diesem Punkt berührende Isotherme wird *kritische Isotherme* genannt. Oberhalb der kritischen Isotherme lassen sich zwei Phasen nicht mehr unterscheiden.

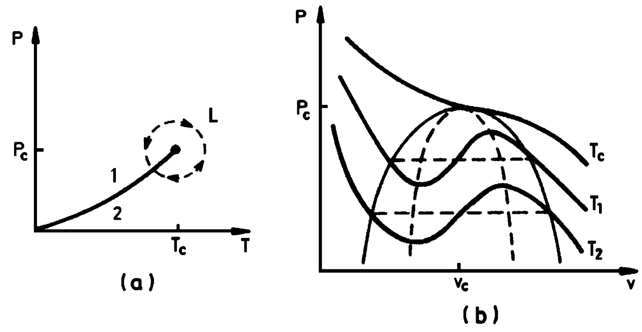

Abbildung 4: a) Verlauf der Kurve für ein System im Phasengleichgewicht; b) $(p-V)$-Kurve für verschiedene Temperaturen [4]

2.4 Ehrenfest-Klassifikation der Phasenübergänge

Ein früher Versuch die Phasenübergänge zu klassifizieren geht auf Ehrenfest (1933) zurück. Nach Ehrenfest wird die Ordnung n eines Übergangs definiert als die Ordnung des niedrigsten Differentialquotienten der freien Enthalpie G, der beim Überschreiten der Koexistenzlinie eine Diskontinuität aufweist [5]. Explizit heißt das:

- 1. bis $(n-1)$te Ableitung von G stetig
- n-te Ableitung von G unstetig
- $(n+1)$te Ableitung von G unendlich

Das Ehrenfest-Schema wurde zurecht kritisiert, weil viele Anwendungen nicht mit dem Schema beschrieben werden konnten. Der Phasenübergang erster Ordnung wird durch das Ehrenfest-Schema korrekt beschrieben, wohingegen bei denen von zweiter Ordnung und höherer Ordnung Zweifel auftraten. Von praktischen Interesse sind eigentlich nur die Phasenübergänge erster und zweiter Ordnung, denn Phasenübergänge höherer Ordnung wurden bisher noch nicht nachgewiesen. Nach strengen Ehrenfestschen Sinn müßten bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung folgende Bedingungen gelten:

1) $G(T,p)$ stetig am Umwandlungspunkt;

2) $S(T,p)$,$V(T,p)$ stetig am Umwandlungspunkt;

3) C_p,κ_T unstetig am Umwandlungspunkt.

Im Experiment aber sind die Phasenübergänge, die nicht von erster Ordnung sind, außer beim Supraleiter durch Singularitäten und nicht durch endliche Sprünge in den

Wärmekapazitäten und Kompressibilitäten bzw. Suszeptibilitäten ausgezeichnet. Beispiele dafür sind der Curie-Punkt-Übergang im Ferromagneten, der Ordnung-Unordnung-Übergang in binärischen Legierungen und der λ-Übergang in flüssigen Helium. In diesen Fällen deuten die Experimente darauf hin, daß die spezifische Wärme logarithmisch am Übergangspunkt divergiert, wie es beim zweidimensionalen Ising-Modell der Fall ist. Soweit die spezifische Wärme in Beziehung steht zu einer zweiten Ableitung von G, können diese Beispiele nicht charakterisiert werden durch das Verhalten von höheren Ableitungen von G, weil sie nicht existieren.

2.5 Klassifizierung der Phasenübergänge nach Landau

Phasenübergänge können für unterschiedliche Stoffe auf unterschiedlichste Art und Weise verlaufen. Der Übergang zwischen verschiedenen kristallinen Modifikationen geschieht durch einen Phasenübergang, bei dem ein sprunghafter Umbau des Kristallgitters stattfindet. Auch Phasenübergänge in Flüssigkeiten und Kristallen sind mit Umstrukturierungen verbunden. So gibt es, zum Beispiel, in Eiskristallen eine Fernordnung der Wassermoleküle (über makroskopische Bereiche), während diese in der Flüssigkeit verloren geht. Auch in der Flüssigkeit gibt es jedoch eine Nahordnung, da die Wassermoleküle (elektrische Dipole) miteinander wechselwirken. Erst in der Gasphase ist der mittlere Abstand der Moleküle so groß, daß diese Wechselwirkung keine große Rolle spielt und sich die Teilchen fast frei bewegen. Flüssigkeiten, Kristalle und kristalline Modifikationen lassen sich also durch ihre innere Symmetrie unterscheiden. Der Phasenübergang verläuft nicht kontinuierlich. Der Zustand des Körpers befindet sich entweder in der einen Phase, die durch ein bestimmte Symmetrie ausgezeichnet ist, oder er befindet sich in einer anderen Phase mit einer anderen Symmetrie. Solche Phasenübergänge werden nach Landau Phasenübergänge *erster Art* oder *diskontinuierliche* Phasenübergänge genannt.
Neben den sprunghaften Übergängen existieren auch solche Übergänge, die kontinuierlich ablaufen und mit einer Symmetrieänderung verbunden sind. Der Zustand des Körpers ändert sich stetig. Diese Art von Übergängen heißen Phasenübergänge *zweiter Art* oder *kontinuierliche* Phasenübergänge [6].

2.5.1 Der Ordnungsparameter

Das Vorkommen von Phasenübergängen bei einer bestimmten Temperatur und Druck kann in bestimmten physikalischen Systemen leicht wahrgenommen werden. Aber in vielen anderen Systemen kann es unter Umständen sehr lange dauern, bis sich eins aus dem Gleichgewicht gebrachtes System wieder ins Gleichgewicht einpendelt. Die Zeit, die es dafür benötigt, nennt man die Relaxationszeit. Sie wächst umso mehr, je mehr man sich dem kritischen Punkt nähert. Endliche Systeme zeigen in der Tat strenggenommen keine Symmtriebrechung, allerdings sind die typischen Zeiten, in denen z. B. ein endlich ausgedehnter Ferromagnet

seine Magnetisierungsrichtung ändert, sehr groß; sie wachsen exponentiell mit dem Volumen des Systems an. Die Entdeckung eines Phasenübergangs impliziert, daß mindestens eine spezifische Größe sich in den zwei Phasen unterscheidet. Dies ist eine der grundlegenden Ideen der Landau-Theorie.
Es zeigt sich, daß man die meisten Umstrukturierungen bei Phasenübergängen durch eine neue makroskopische Größe, den sogenannten Ordnungsparameter, beschreiben kann. Die Bezeichnung drückt aus, daß dieser Parameter etwas mit dem Wechsel des Ordnungszustandes zu tun hat. In einem thermodynamischen Viel-Teilchen-System stehen nämlich stets zwei gegenläufige Tendenzen im Wettstreit, was leicht an der Definition der freien Energie $F = U - TS$ ersichtlich wird. Diese muß im Gleichgewicht ein Minimum annehmen. Eine möglichst kleine Energie U ist demnach günstig, was in der Regel als Folge der Teilchenwechselwirkungen durch hohe Ordnung im System erreicht wird. Günstig wäre aber auch eine möglichst große Entropie S. Diese impliziert nun aber eine möglichst hohe Unordnung im System. Die beiden gegenläufigen Tendenzen erfordern einen Kompromiß, der von der Temperatur abhängig ist.
Bei Temperaturen unter der kritischen Temperatur beobachtet man nur Phasenübergänge erster Art, wo eine Mischung der Phasen im Koexistenzbereich stattfindet. Bei Phasenübergängen zweiter Art unterscheiden sich die Phasen je nach Temperatur durch verschiedene Symmetrieeigenschaften. Die Phasen bei höherer Temperatur sind symmetrischer und ungeordneter, während die Phasen bei tieferer Temperatur unsymmetrischer und geordneter sind. Dies nutzt man aus, indem man den Ordnungsparameter mit Hilfe von thermodynamischen Größen so definiert, daß er in der ungeordneten Phase Null und in der geordneten Phase von Null verschieden ist.
Als Ordnungsparameter eines ferromagnetischen Phasenübergangs bietet sich die Magnetisierung $\mathbf{M}$ an. Im geordneten Zustand, alle Spinmomente sind gleichgerichtet, zeichnet die Richtung der Magnetisierung eine Vorzugsrichtung im Raum aus. Bezüglich Drehungen ist also der geordnete Zustand unsymmetrisch. Wirkt auf den Ferromagneten ein äußeres Feld $\mathbf{B}$ ein, so ist in der Hamiltonfunktion eine Vorzugsrichtung ausgezeichnet, nach der sich die Magnetisierung einstellen wird. Die Drehsymmetrie ist durch das äußere Feld $\mathbf{B}$ explizit gebrochen. Wird die Übergangstemperatur unterschritten, so springt die Magnetisierung. Wird der Ferromagnet durch ein äußeres Feld beeinflußt, so können nur Phasenübergänge erster Art auftreten. Ist $\mathbf{B} = 0$, so wird bei Unterschreitung der kritischen Übergangstemperatur, von dem System spontan eine Magnetisierungsrichtung $\mathbf{M}$ gewählt. In diesem Fall spricht man von spontaner Symmetriebrechung, weil der realisierte Zustand eine geringere Symmetrie als die Hamiltonfunktion hat. Für $\mathbf{B} = 0$ findet also ein Phasenübergang zweiter Art statt. Abbildung 5 zeigt den Ordnungsparameter $\mathbf{M}$ und die spezifische Wärme C in Abbängigkeit von der Temperatur für einen Phasenübergang erster und zweiter Art. Der Nachweis eines Phasenübergangs zweiter Art könnte sich aufgrund des singulären Verhaltens

Abbildung 5: Ferromagnet: Ordnungsparameter M und spezifische Wärme bei Phasenübergängen: a) 1. Art; b) 2. Art (schematisch) [1]

thermodynamischer Größen am kritischen Punkt als schwierig erweisen. Um diese Schwierigkeit zu umgehen, führt man den thermodynamischen Limes ein:
Viele Aussagen der statistischen Mechanik treffen nur dann zu, wenn es sich um 'genügend große' Systeme mit 'genügend vielen Freiheitsgraden' handelt. Um jetzt über ein beliebiges System Aussagen machen zu können, ist es nützlich, das System im sogenannten thermodynamischen Grenzfall ($V \to \infty$, $N \to \infty$, bei festgehaltenen intensiven Variablen) zu betrachten. So gilt, zum Beispiel, die Äquivalenz zwischen verschiedenen Gesamtheiten nur im thermodynamischen Grenzfall. Die bei endlichen Systemen wichtigen Randeffekte verschwinden für den Grenzfall $V \to \infty$. Die thermodynamischen Größen sind für endliche Systeme immer analytische Funktionen ihrer Parameter. Phasenübergänge im Sinne singulären Verhaltens thermodynamischer Größen treten strenggenommen nur bei unendlich vielen Freiheitsgraden auf. Die spontane Symmetriebrechung, wie es gerade am Beispiel des Ferromagneten beschrieben wurde, gibt es nur im thermodynamischen Grenzfall. Für endliche Systeme erfolgt die Brechung der Symmetrie immer explizit, z. B. durch äußere Felder oder die Wahl der Randbedingungen [7].

Da der Ordnungsparameter eine thermodynamische Größe ist und die Symmetrie in einem System beschreibt, muß dieser ebenfalls im thermodynamischen Grenzfall betrachtet werden [8]:
Kann ein System durch die Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$ und den Ordnungsparameter ϕ beschrieben werden, so lautet die zugehörige kanonische Zustandssumme:

$$\mathcal{Z}(\beta, h) = \sum_{\text{über alle Konfigurationen}} \exp\left[-\beta(\mathcal{H} - h\phi)\right], \tag{2.2}$$

wobei $\beta = 1/kT$ der Boltzmannfaktor ist. Das äußere Feld h ist die zu ϕ konjugierte Variable. Da es sich beim Ordnungsparameter wie bei den anderen thermodynamischen Größen um eine makroskopische Größe handelt, muß man seinen Mittelwert betrachten. Der Mittelwert des Ordnungsparameters ergibt sich aus dem Grenzwert für ein verschwindendes äußeres Feld.

$$\langle \phi \rangle = \lim_{h \to +0} \langle \phi \rangle_h \ , \tag{2.3}$$

wobei

$$\langle \phi \rangle_h = \lim_{V \to \infty} \left\{ \frac{\sum \phi \exp\left[-\beta(\mathcal{H} - h\phi)\right]}{\sum \exp\left[-\beta(\mathcal{H} - h\phi)\right]} \right\}. \tag{2.4}$$

Somit folgt für den Ordnungsparameter [2] ϕ:

$$\langle \phi \rangle = \lim_{h \to +0} \lim_{V \to \infty} \beta^{-1} [\partial \ln \mathcal{Z}(\beta, h) / \partial h]. \tag{2.5}$$

Im thermodynamischen Grenzfall soll z. B. der Erwartungungswert des Ordnungsparameters in der Tieftemperaturphase auch dann von Null verschieden sein, wenn man das Feld h gegen Null gehen läßt. Das Ergebnis hängt also von der Reihenfolge der Grenzwertbildungen $h \to 0$ und $V \to \infty$ ab.
Allgemein findet man für den Ordnungsparameter:

$$\begin{aligned} \langle \phi \rangle &= 0 \quad \text{für} \quad T > T_C \\ \langle \phi \rangle &\neq 0 \quad \text{für} \quad T < T_C. \end{aligned}$$

Die große kanonische Zustandsumme Ξ für die eben betrachtete Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$ und das äußere Feld h lautet:

$$\Xi = \sum \exp\left\{-\beta\left[\mathcal{H} - \mu N - V(h\phi)\right]\right\} \tag{2.6}$$

Den Druck erhält man in üblicher Form (siehe [7])aus dem Logarithmus der großen Zustandssumme:

$$p = p(T, \mu, h) = \lim_{V \to \infty} (\beta V)^{-1} \ln \Xi(T, \mu, h). \tag{2.7}$$

Die thermodynamischen Eigenschaften werden durch die *Gibbs-Duhem-Relation*

$$dp = s dT + \rho d\mu + \phi^* dh, \tag{2.8}$$

bestimmt, wobei ρ die mittlere Dichte und s und ϕ^* die Entropie und der Ordnungsparameter pro Volumeneinheit sind. Somit ist

$$s = \frac{\partial p}{\partial T}, \quad \rho = \frac{\partial p}{\partial \mu}, \quad \phi^* = \frac{\partial p}{\partial h}. \tag{2.9}$$

[2] Dieses Verfahren ist natürlich geeignet, um den Mittelwert jeder beliebigen thermodynamischen Variable auszurechnen, egal ob es ein Ordnungsparameter ist oder nicht.

2.5.2 Die Korrelationsfunktion und die Korrelationslänge

Der Ordnungsparameter ϕ kann je nach System eine skalare, vektorielle und im kompliziertesten Fall ein mehr-komponentige Größe sein. In der Landau-Theorie, wird die Größe ϕ als makroskopische Variable unabhängig von den lokalen Koordinaten betrachtet. Aber in Wirklichkeit ist der Ordnungsparameter, wie andere charakteristische Größen des Systems, eine fluktuierende Größe und ändert sich von Punkt zu Punkt. Die Fluktuationen werden um so größer, je mehr man sich den kritischen Bereich, also der kritischen Temperatur eines thermodynamischen Systems, nähert. Da es sich beim Ordnungsparameter um eine makroskopische Größe handelt, sollte die charakteristische Länge, die sog. *Korrelationslänge*, über die $\phi(\mathbf{r})$ variert, in der Nähe eines Phasenübergang zweiter Art wesentlich größer sein als die Reichweite üblicher Teilchenwechselwirkungen. Die Folge ist, daß physikalische Eigenschaften nicht so sehr durch die spezielle Form der Teilchenwechselwirkungen bestimmt werden, als vielmehr durch die Ausdehnung der kohärenten Schwankungen des Ordnungsparameters. Die Folge ist ein verblüffend universelles physikalisches Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes. Ganz verschiedene Eigenschaften sehr unterschiedlicher Systeme unterliegen in der Nähe der kritischen Temperatur T, die von System zu System auch noch um Größenordnungen variieren kann, völlig analogen Gesetzmäßigkeiten. Man spricht von der Universalität der kritischen Phänomene. Diese Universalität erklärt das heftige Interesse an kritischen Phänomenen, obwohl sie sich im Bereich der kritischen Fluktuationen, also in einem sehr schmalen Temperaturbereich, abspielen.
Neben den globalen thermodynamischen Größen liefert die Korrelationsfunktion wichtige Informationen über das Verhalten thermodynamischer Systeme beim Phasenübergang:

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \phi(\mathbf{r}) \cdot \phi(\mathbf{r}') \rangle - \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle \cdot \langle \phi(\mathbf{r}') \rangle. \tag{2.10}$$

Dabei stellt der Ordnungsparameter $\phi(\mathbf{r})$ die Dichte einer Größe Φ dar:

$$\Phi = \int d^3 r \phi(\mathbf{r}). \tag{2.11}$$

Bei großen Entfernungen ($|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \to \infty$) faktorisiert der erste Term von $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ in ein Produkt von Mittelwerten, $\langle \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \rangle \to \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle \langle \phi(\mathbf{r}') \rangle$, und $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ wird Null. In der ungeordneten Phase gilt:

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \xrightarrow[|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \to \infty]{} 0. \tag{2.12}$$

In der geordneten Phase ist der Grenzwert der Korrelationsfunktion endlich und man spricht von langreichweitiger Ordnung.

Beispiele für Korrelationsfunktionen

1) Dichte-Korrelation, Paarkorrelation

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= n(\mathbf{r}) \quad (Teilchendichte) \\ \Phi &= N \quad (Teilchenzahl) \\ g(\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \langle n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')\rangle - \langle n(\mathbf{r})\rangle \langle n(\mathbf{r}')\rangle . \end{aligned} \tag{2.13}$$

2) Spin-Korrelation

$$\begin{aligned} \Phi = m = \mu \textstyle\sum_i S_i : &\quad \text{magnetisches Gesamtmoment,} \\ \phi(\mathbf{r}) \longleftrightarrow S_i : &\quad \text{Spin,} \\ g_{ij} = &\quad \langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle \langle S_j\rangle . \end{aligned} \tag{2.14}$$

2.5.3 Phasenübergänge erster Art

Als Beispiel betrachtet man ein Flüssigkeit-Gas-Gemisch längs der Koexistenzlinie (siehe Abbildung 6). Phasenübergänge erster Art sind, wie schon erwähnt, mit sprunghaften Änderungen struktureller Art verbunden. Bei diesem Umwandlungstyp wird eine definierte Energiemenge frei oder verbraucht (latente Umwandlungswärme).Der Übergang erfolgt bei konstanter Temperatur und konstanten Druck. Im Übergangsgebiet liegt ein Gemisch aus Flüssigkeit im Zustand (α) und Gas im Zustand (β) vor. Im Zwei-Phasen-Gebiet führt eine Wärmezufuhr zu einer Umwandlung einer gewissen Flüssigkeitsmenge in Dampf. Betrachten wir den Übergang speziell bei konstantem Druck. Das am Punkt (α) homogene System spaltet sich bei Zufuhr von Wärme in zwei koexistierende Komponenten auf; es erhöht seine Temperatur nicht: Der Vorgang verläuft isotherm, da die Wärmemenge ausschließlich dazu verwendet wird, die Teilchenbindungen zu überwinden. Erst wenn bei (β) die gesamte Flüssigkeit in Dampf verwandelt ist, sorgt eine weitere Wärmezufuhr für eine Temperaturerhöhung. Diese Wärmeenergie, die zur Überwindung der Kohäsionskräfte benötigt wird, ist die latente Umwandlungsenergie. Sie ergibt sich aus der Clausius-Clapeyron-Gleichung:

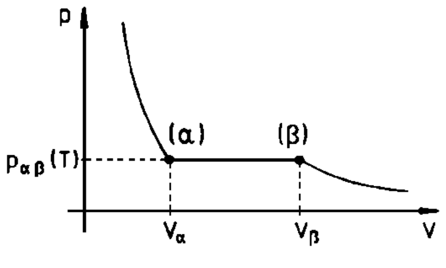

Abbildung 6: $(p-V)$-Diagramm eines Flüssigkeit-Gas-Gemischs (schematisch) [5]

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\Delta Q}{T(v_g - v_f)}, \tag{2.15}$$

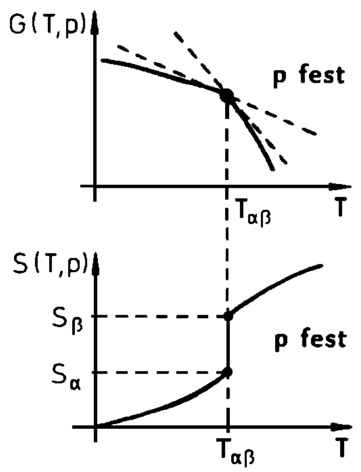

Abbildung 7: Freie Enthalpie und Entropie in Abhängigkeit von der Temperatur (schematisch) [5]

$\Delta Q = T(s_g - s_f)$ ist die latente Umwandlungswärme pro Teilchen, $v_g(v_f)$ und $s_g(s_f)$ sind das Volumen und die Entropie pro Teilchen in der Gas- bzw. Flüssigkeitsphase. Die Gleichung macht nur Sinn, wenn die Entropie und Volumina für Gas (s_g, v_g) und Flüssigkeit (s_f, s_g) auf der Koexistenzlinie unterschiedlich sind. Die Koexistenz der beiden Phasen bei $(T < T_c, p = p_{\alpha\beta})$ hat zur Folge, daß die Enthalpie der flüssigen Phase gleich der der gasförmigen Phase ist: $G_f(T, p_{\alpha\beta}) = G_g(T, p_{\alpha\beta})$ (siehe Abbildung 7).
Der Phasenübergang erster Art manifestiert sich also in einer Unstetigkeit der thermodynamischen Größen:

$$S = \left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p, \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T, \quad D_Z = \left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_T \quad \text{unstetig,} \tag{2.16}$$

wobei D_Z das magnetische Dipolmoment ist.
Die Unstetigkeit bewirkt eine Divergenz in den ersten Ableitungen der thermody-

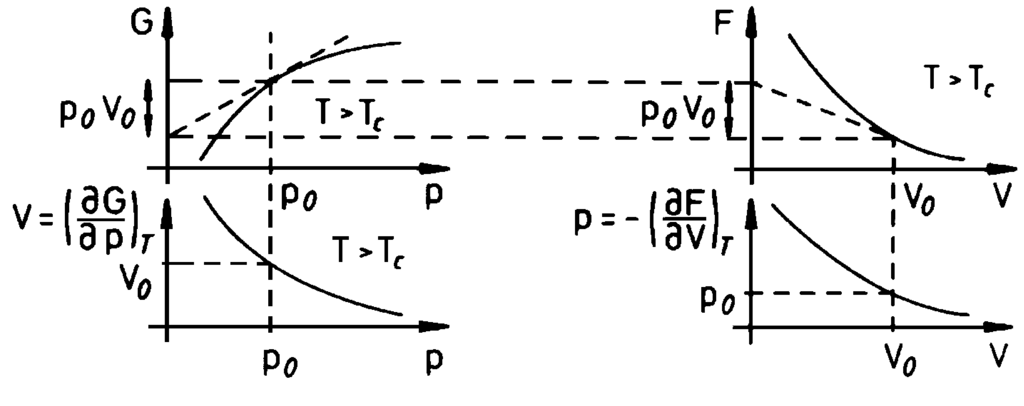

Abbildung 8: Freie Enthalpie und Volumen in Abhängigkeit vom Druck und freie Energie F und Druck in Abhängigkeit vom Volumen für einen Phasenübergang 1. Art (schematisch) [5]

namischen Größen wie Wärmekapazitäten C_p, Kompressibilität κ, Ausdehnungskoeffizient α oder Suszeptibilität χ:

$$
\begin{aligned}
C_p &= T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = -T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_p, \quad \kappa = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_T, \\
\alpha &= \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{V}\frac{\partial^2 G}{\partial p \partial T}, \qquad \chi = \left(\frac{\partial D_Z}{\partial H}\right)_T = -\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}\right)_T .
\end{aligned} \tag{2.17}
$$

Somit ist ein Phasenübergang erster Art charakterisiert

1.) durch einen Bereich der Koexistenz der beiden Phasen:

   ⇒ der Übergang kann bei irgendeiner Temperatur in diesem Bereich stattfinden.

   ⇒ eine Folge des Instabilitätsbereichs ist, daß eine thermische Hysterese, wie Unterkühlung oder Überhitzung, beobachtet werden kann.

2.) durch einen Sprung des Ordnungsparameters am Übergangspunkt,

3.) durch eine latente Umwandlungswärme,

4.) durch eine mikroskopische Korrelationslänge, die am Übergangspunkt endlich ist.

Beispiele für solche Phasenübergänge sind die Verdampfung, das Schmelzen, die Sublimation und viele Übergänge eines Festkörpers von einer kristallinen Modifikation in eine andere.

2.5.4 Phasenübergänge zweiter Art

Phasenübergänge zweiter Art finden am kritischen Punkt eines Körpers statt. Im kritischen Punkt fallen die zwei Phasen zu einer Phase zusammen. Zwar ändert sich der Zustand des Körpers kontinuierlich, aber im Übergangspunkt erhält er qualitativ völlig neue Eigenschaften. Die Symmetrieänderungen beim Übergang lassen sich von dem in Kapitel 2.5.1 vorgestellten Ordnungsparameter beschreiben. Die Phase über der kritischen Temperatur (Hochtemperaturphase) ist symmetrischer, während die Phase unter der kritischen Temperatur (Tieftemperaturphase) eine Symmetrie aufweist, die niedriger ist als die in der Hochtemperaturphase. Man sagt, die Symmetrie wird beim Übergang in die Tieftemperaturphase gebrochen. Der Ordnungsparameter geht beim Übergang von der weniger symmetrischen Phase in die symmetrische Phase stetig gegen Null. Beim Übergang treten keine spontanen Änderungen von innerer Energie und Dichte auf. Sie sind aber von sprungartigen Änderungen der spezifischen Wärme und der thermodynamischen Ausdehnungs- bzw. Kompressionskoeffizienten begleitet.

stetig	unstetig	
$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p$	$C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V\Big\vert_{T_C}$	$\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T\Big\vert_{T_C}$
$V = -\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T$	$C_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p\Big\vert_{T_C}$	$\chi_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}\right)_T\Big\vert_{T_C}$

Da das Volumen und die Entropie stetig sind, tritt beim Phasenübergang zweiter Art keine Umwandlungwärme auf und es findet keine Volumenänderung statt. In den kritischen Bereichen nimmt die Korrelationsfunktion näherungsweise die Gestalt

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = c_0 \frac{exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\,|/\xi(T))}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\,|} \tag{2.18}$$

an. $\xi(T)$ ist die Korrelationslänge. Sie divergiert im kritischen Bereich:

$$\xi(T) \xrightarrow[T \to T_C]{} \infty. \tag{2.19}$$

Beispiele für Phasenübergänge zweiter Art ist der Übergang am Curiepunkt in ferromagnetischen oder antiferromagnetischen Stoffen, der Übergang eines Metalls in den supraleitenden Zustand ohne äußeres Magnetfeld und der Übergang von flüssigen Helium in den superfluiden Zustand.

2.6 Die Landau-Theorie

Landau fand 1937 einen allgemeinen mathematischen Ansatz, um das Verhalten thermodynamischer Größen in der Nähe der kritischen Temperatur eines Systems zu beschreiben [6]. Die Landau-Theorie ist eine phänomenologische Methode, die sich nur mit makroskopischen Größen befasst. In dieser Theorie spielt der Ordnungsparameter und das thermodynamische Potential eine zentrale Rolle. In der einfachen Form der Landau-Theorie wird davon ausgegangen, daß sich das System durch einen einzigen Ordnungsparameter [3] charakterisieren läßt. Der Ordnungsparameter beschreibt die Abweichung der Atom- oder Spinkonfiguration eines Systems der weniger symmtrischen Phase von der der symmetrischen Phase, d. h. das thermische Potential Φ wird als Funktion vom Druck p, der Temperatur T und dem Ordnungsparameter ϕ betrachtet. Während der Druck und die Temperatur beliebig gewählt werden können, wird der Wert für ϕ aus der Bedingung für das thermische

[3] Ein System läßt sich auch mit mehreren Ordnungsparametern beschreiben, was in diesem Abschnitt aber nicht behandelt werden soll

Gleichgewicht bestimmt, d. h. aus der Bedingung, daß Φ (bei gegebenen Werten von p und T) ein Minimum haben muß. Landau nimmt an, daß das Potential Φ (z. B. die Freie Energie F) eine analytische Funktion von ϕ am kritischen Punkt ist, was natürlich nicht korrekt ist. Da der kontinuierliche Phasenübergang stetig erfolgt, nimmt ϕ im kritischen Bereich beliebig kleine Werte an. Daher ist es möglich, Φ in der Umgebung von der kritischen Temperatur T_C in einer Potenzreihe nach ϕ zu entwickeln:

$$\Phi(p, T, \phi) = \Phi_0 + \alpha\phi + A\phi^2 + C\phi^3 + B\phi^4 + D\phi^5 + E\phi^6 + \dots, \tag{2.20}$$

wobei die Koeffizienten α, A, B, $C, \dots$ Funktionen von p und T sind.

2.6.1 Der Phasenübergang zweiter Art am Beispiel des Ferromagneten

Der Ordnungsparameter für die Beschreibung eines Ferromagneten sei das magnetische Moment $\mathbf{M}$. Die kritische Temperatur eines Ferromagneten wird oft auch Curie-Temperatur genannt. Überhalb der kritischen Temperatur T_C eines magnetischen Stoffes verschwindet die Magnetisierung und unterhalb der Curie-Temperatur setzt eine spontane Magnetisierung ein. Beim magnetischen Moment sind ohne äußeres Feld alle Richtungen (also speziell $\phi = \pm\mathbf{M}$) gleichberechtigt, daher treten keine ungeraden Potenzen im thermodynamischen Potential auf und man kann mit den Betrag von $\mathbf{M}$ rechnen ($|M| = M$). Bei Vernachlässigung größerer Potenzen von M sieht (2.20) für einen ferromagnetischen Stoff folgendermaßen aus:

$$\Phi(T, M) = \Phi_0(T) + AM^2 + BM^4. \tag{2.21}$$

Damit das Potential Φ ein Minimum annimmt, muß der Koeffizient A in der symmetrischen Phase größer Null und in der unsymmetrischen kleiner Null sein; die Übergangspunkte werden aus der Gleichung $A(T) = 0$ bestimmt. Weiterhin wird angenommen, daß die Funktion A(T) in den Übergangspunkten keine Singularität [4] hat, so daß in der Nähe der Punkte die Funktion A(T) nach Potenzen der Differenz $(T - T_C)$ entwickelt werden kann, d. h.

$$A(T) = a(T - T_C). \tag{2.22}$$

Der Koeffizient B sei in der Nähe des kritischen Punktes positiv und langsam variabel, so daß er durch seinen Wert für $T = T_C$ ersetzt werden kann. Ist dies nicht der Fall, dann befindet sich bei T_C oder in der Nähe von T_C ein trikritischer Punkt und wir müssen einen M^6-Term miteinbeziehen. Dann lautet (2.21):

$$\Phi(T) = \Phi_0(T) + a(T - T_C)M^2 + BM^4. \tag{2.23}$$

[4] Vom mathematischen Standpunkt aus gesehen, ist der kritische Punkt ein singulärer Punkt der thermodynamischen Größen. Diese Singularität bewirkt das anomale Anwachsen der Fluktuationen im kritischen Bereich. Im Landau-Ansatz werden diese Fluktuationen aber vernachlässigt.

Den Wert für ϕ erhält man, indem man die Minima von $\Phi(T)$ berechnet, also die die Ableitung $\frac{\partial \Phi}{\partial \phi}$ gleich Null setzt:

$$\frac{\partial \Phi(T)}{\partial M} = 2a(T - T_C)M + 4BM^3 = 0. \tag{2.24}$$

Aus Gleichung (2.24) folgt:

$$\begin{aligned} &\text{für} \quad T > T_C \ (a > 0): \quad M = 0 \quad \text{und} \\ &\text{für} \quad T < T_C \ (a < 0): \quad M = \pm\sqrt{\frac{a}{2B}(T_C - T)}. \end{aligned} \tag{2.25}$$

In Abbildung 9 ist der Verlauf des Potentials (2.23) skizziert. Wenn man die höheren

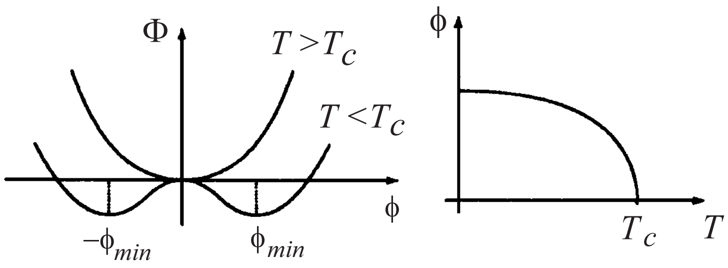

Abbildung 9: Landaupotential für einen Phasenübergang 2. Art und ϕ in Abhängigkeit von T (schematisch) [9]

Potenzen von ϕ vernachlässigt, findet man für die Entropie:

$$S = \frac{\partial \Phi}{\partial T} = S_0 - \frac{a}{2}M^2. \tag{2.26}$$

mit Gleichung (2.25) folgt dann

$$\begin{aligned} &\text{für} \quad T > T_C: \quad S = S_0 \quad \text{und} \\ &\text{für} \quad T < T_C: \quad S = S_0 + \frac{a^2}{2}\frac{(T - T_C)}{B}. \end{aligned} \tag{2.27}$$

Die Entropie bleibt stetig, denn der Ausdruck für die Entropie für $T < T_C$ reduziert sich im Übergangspunkt auf S_0. Nun können wir mit Gleichung (2.27) die Wärmekapazität der beiden Phasen in dem Übergangspunkt bestimmen:

$$C_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = C_{p_0} + \frac{a^2 T_C}{2B}. \tag{2.28}$$

Für die symmetrische Phase ist $S = S_0$ und deshalb $C_p = C_{p_0}$. Hier wird noch einmal der Sprung der Wärmekapazität beim Phasenübergang zweiter Art deutlich. Um nun den Einfluß eines äußeren Feldes auf einen Phasenübergang zu betrachten, muß man der Entwicklung (2.23) ein Glied der Form $\mathbf{H} \cdot \mathbf{M}$ hinzufügen:

$$\Phi(T) = \Phi_0(T) + a(T - T_C)\mathbf{M}^2 + B\mathbf{M}^4 - \mathbf{HM} \tag{2.29}$$

$\mathbf{H}$ ist das äußere magnetische Feld, daß auf den Körper einwirkt. Vernachlässigt man die magnetische Anisotropie eines ferromagnetischen Stoffes, so fallen die Richtungen der Vektoren $\mathbf{M}$ und $\mathbf{H}$ zusammen, so daß man auch hier mit den Beträgen rechnen kann. Schon ein kleines Feld $\mathbf{H}$ führt dazu, daß der Parameter ϕ in dem ganzen Temperaturbereich von Null verschieden ist. Das Feld erniedrigt sozusagen die Symmetrie der symmetrischen Phase, so daß der Unterschied zwischen beiden Phasen verschwindet. Die Abhängigkeit von ϕ von dem Feld $\mathbf{H}$ hat bei Temperaturen oberhalb und unterhalb von der Curie-Temperatur einen unterschiedlichen Charakter:

$T > T_C$ ($M = 0$ für $H = 0$) :

$$\chi = \lim_{H\to 0}\left(\frac{\partial M}{\partial H}\right) = \frac{1}{a(T - T_C)}$$

und

$T < T_C$ $\left(M = \sqrt{\frac{a}{2B}(T_C - T)} \text{ für } H = 0\right)$:

$$\chi = \frac{1}{2a(T_C - T)} \quad \text{mit} \quad \chi \gtrsim 1. \tag{2.30}$$

χ ist hier die magnetische Suszeptibilität. Sie divergiert am kritischen Punkt wie $1/(T - T_C)$ (CURIE-WEISSsches Gesetz). Der Vorfaktor ist für $T > T_C$ doppelt so groß wie für $T < T_C$. Analog kann man für andere Systeme die entsprechenden Ordnungsparameter und Suszeptibilitäten benennen. Zum Beispiel ist bei einem Phasenübergang gasförmig-flüssig der Ordnungsparameter ϕ die Dichtedifferenz, $\phi = \Delta\rho = \rho_{fl} - \rho_g$, oder bei gegebener Teilchenzahl die Differenz der spezifischen Volumnina, $\phi = v_g - v_{fl}$ und die Suszeptibilität χ ist bis auf einen Faktor die isotherme Kompressibilität κ.

2.6.2 Bestimmung der kritischen Exponenten

Empirischen Daten und Ergebnisse von numerischen Berechnungen veranlaßten Landau das Verhalten der thermodynamischer Größen in der Nähe des kritischen Punktes abzuschätzen. Die thermodynamischen Größen gehorchen Potenzgesetzen, die durch die sogenannten kritischen Exponenten bestimmt sind. Mit Hilfe dieser Potenzgesetze, lassen sich die kritischen Exponenten für den Ferromagneten in der

Landau-Theorie berechnen. Man beachte, daß die räumliche Dimension des Systems in der Landau-Betrachtung keine Rolle spielt, also dimensionsabhängige kritische Exponenten nicht wiedergeben kann.

(a) Exponent $\boldsymbol{\beta}$:

$$\text{Mit (2.25) und } M \sim (-\tau)^{\beta}, \text{ wobei } \tau = \frac{T - T_C}{T_C}, \text{ folgt:}$$
$$M = \pm\sqrt{\frac{-a\,T_C}{2B}}\left(-\frac{1}{T_C}|T_C - T\,|\right)^{1/2} \quad \Rightarrow \boldsymbol{\beta = 1/2} \tag{2.31}$$

(b) Exponent $\boldsymbol{\alpha}$:

$$\text{Mit} \quad C_p \sim |\tau|^{-\alpha} \quad \text{und} \quad C_p = \frac{a^2 T_C}{2B} \quad \Rightarrow \boldsymbol{\alpha = 0} \tag{2.32}$$

(c) Exponent $\boldsymbol{\gamma}$:

$$\text{Mit} \quad \chi \sim |\tau|^{-\gamma} \quad \text{und} \quad \left.\begin{aligned} \chi &= \frac{1}{a}(T_C - T)^{-1} \\ \chi &= \frac{1}{2a}(T_C - T)^{-1} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boldsymbol{\gamma = 1} \tag{2.33}$$

(d) Exponent $\boldsymbol{\delta}$:
Leitet man Gleichung (2.29) nach M ab, so erhält man:

$$\frac{\partial \Phi(T)}{\partial M} = 0 = A(T)M + BM^3 - H. \tag{2.34}$$

Die Koeffizienten $A(T)$ und $B(T)$ sollten von H unabhängig sein, so daß $A(T_C) = 0$ und $B(T_C) = B$ angenommen werden kann. Auf der kritischen Isotherme $T = T_C$ gilt somit:

$$H = BM^3 \Leftrightarrow M = \frac{1}{B}H^{1/3}. \tag{2.35}$$

$$\text{Mit} \quad M \sim H^{1/\delta} \quad \text{und} \quad M = \frac{1}{B}H^{1/3} \quad \Rightarrow \boldsymbol{\delta = 3} \tag{2.36}$$

Eine Erweiterung der Landau-Theorie erhält man, wenn man die Ortsabhängigkeit des Ordnungsparameters zuläßt, also $\phi = \phi(\mathbf{r})$. Berücksichtigt man nur Abhängigkeiten des Potentials in Form der ersten Ableitungen von Φ, dann wird der Landau-Ansatz (2.20) zum Ginzburg-Landau-Ansatz:

$$\Phi(p, T, \phi(\mathbf{r})) = \phi_0 + \int dr^3 \left[A(\nabla\phi)^2 + a(T - T_C)\phi^2 + B\phi^4 - h\phi\right]. \tag{2.37}$$

Mit diesem Ansatz können die kritischen Exponenten für die Korrelationsfunktion und für die Korrelationslänge bestimmt werden, die ebenfalls im kritischen Bereich ein Potenzverhalten zeigen. Demnach wird das Minimum des Funktionals $\Phi(p, T, \phi(\mathbf{r}))$ gesucht. Die Aufgabe kann mit Hilfe der Variationsrechnung gelöst werden. Als Lösung für die Korrelationslänge erhält man:

$$\xi = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{A}{a|T - T_C|}} & (T > T_C) \\[2ex] \sqrt{\dfrac{A}{2a|T - T_C|}} & (T < T_C) \end{cases} \tag{2.38}$$

Mit der Abschätzung $\xi \sim |\tau|^{\nu}$ und Gleichung (2.38) ergibt sich für den kritischen Exponenten ν:

$$\xi = \sqrt{\frac{A\,T_C}{a}} \left(\frac{|T - T_C|}{T_C}\right)^{-1/2} \quad \Rightarrow \boldsymbol{\nu = 1/2}. \tag{2.39}$$

Wegen der divergierenden Korrelationslänge vereinfacht sich Gleichung (2.18) für $T = T_C$ zu:

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = c_0 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \tag{2.40}$$

Im kritischen Bereich gilt für die Korrelationsfunktion:

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-(d-2+\eta)}, \tag{2.41}$$

wobei d die Raumdimension ist. Da $d = 3$ ist, folgt für η:

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-(d-2+\eta)} \quad \Rightarrow -(3 - 2 + \eta) = -1 \quad \Rightarrow \boldsymbol{\eta = 0}. \tag{2.42}$$

Die Bedeutsamkeit der kritischen Exponenten für die Phasenübergänge zeigt sich in ihrer Universalität: Denn die eben berechneten kritischen Exponenten gelten auch für andere Systeme gleicher Dimension des entsprechenden Ordnungsparameters, z. B. für ein Flüssigkeit-Gas-Gemisch. Da in der Landau-Theorie nur der mittlere Wert des Ordnungsparameters behandelt wird, während seine Fluktuationen vernachlässigt werden, ist sie eine Theorie mittlerer Felder, die man auch Molekularfeldtheorie nennt. Sie zählt zu den klassischen Theorien der Phasenübergänge, weil sie nur für gewisse Bereiche gültig ist, die im nächsten Abschnitt erläutert werden.

2.6.3 Gültigkeit der Ginzburg-Landau-Theorie

Wenn man die absoluten Werte der kritischen Exponenten der Ginzburg-Landau-Theorie (GL) mit den experimentellen Werten für ein-, zwei- und dreidimensionale Systeme (Exp) vergleicht, sieht man, wie erheblich die Werte der Ginzburg-Landau-Theorie von den experimentellen Werten abweichen:

$$\begin{array}{llllll} \text{GL} & \alpha = 0 & \beta = 1/2, & \gamma = 1, & \delta = 3, & \nu = 1/2 \\ \text{Exp:} & \alpha \approx 0, & \beta \approx 1/3, & \gamma \approx 4/3, & \delta \approx 4.5, & \nu \approx 1/3. \end{array} \tag{2.43}$$

Die Ginzburg-Landau-Theorie beschreibt die kritischen Phänomene qualitativ weitgehend zutreffend. Quantitativ gibt sie aber, wie man oben beim Vergleich der kritischen Exponenten sehen kann, nur näherungsweise die experimentelle Ergebnisse wieder.

Das Modell berücksichtigt zwar die thermischen Fluktuationen, aber tatsächlich sind diese Fluktuationen nahe T_C viel stärker als in der Ginzburg-Landau-Theorie angenommen wird. Der Ginzburg-Landau-Ansatz setzt voraus, daß die thermischen Fluktuationen $\Delta\Phi_{therm}$ klein gegenüber dem Mittelwert sind:

$$\Delta\Phi^2_{therm} \ll \langle\Phi\rangle^2 = \frac{a}{2B}|T - T_C\,| \tag{2.44}$$

mit

$$\Delta\Phi^2 \approx \frac{k_B\,T}{A^{d/2}|a(T - T_C\,)|^{d/2-1}}, \tag{2.45}$$

wobei k_B die Boltzmannkonstante ist. Daraus ergibt sich das sogenannte *Ginzburg-Landau-Kriterium*, das den Gültigkeitsbereich dieser Theorie bestimmt:

$$\frac{B}{A^{d/2}} k_B\,T\,|a(T - T_C\,)|^{d/2-2} \ll 1. \tag{2.46}$$

Für $d > 4$ ist das Kriterium erfüllbar, für $d < 4$ stets verletzt. Für $d = 4$ hat sich gezeigt, daß die Ginzburg-Landau-Theorie weitgehend gültig ist. Für reale Systeme ($d = 3$) wird die Ginzburg-Landau-Theorie oft sehr unzuverlässig. Allerdings gibt es sogar zweidimensionale Systeme, für die die Ginzburg-Landau-Theorie gute Vorhersagen liefert. Sie kann also als Ausgangspunkt für weitere einfache Modellsysteme dienen.

2.6.4 Phasenübergänge erster Art in der Landau-Theorie

Bei diesen Übergängen müssen höhere Potenzen des Ordnungsparameters im Landau-Ansatz mit in Betracht gezogen werden. Der Landau-Ansatz (2.20) beschreibt einen Phasenübergang erster Art, zwischen zwei Phasen I und II, wenn die Koeffizienten B negativ und E positiv sind [10]. Der Koeffizient α ist wieder gleich $a(T-T_C)$ mit $a>0$:

$$\Phi(T,\phi)=\Phi_0+a(T-T_C)\phi^2+B\phi^4+E\phi^6. \tag{2.47}$$

Die Bedingungen für die Minima des Potentials Φ lauten:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\phi} = \phi(2a(T-T_C)+4B\phi^2+6E\phi^4)=0 \tag{2.48}$$

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} = 2a(T-T_C)+12B\phi^2+30E\phi^4>0 \tag{2.49}$$

Der Verlauf des Potentials Φ ist für verschiedenene Temperaturen in Abbildung 10

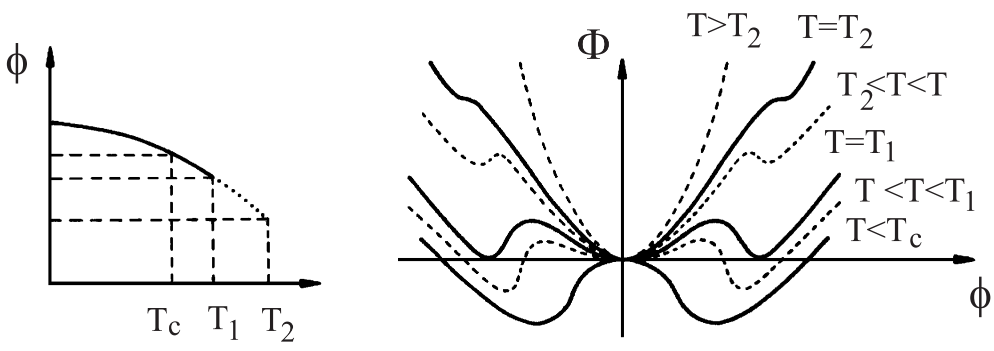

Abbildung 10: Phasenübergang 1. Art: Temperaturabhängigkeit des Ordnungsparameters(links) und Variation des Landaupotentials als Funktion des Ordnungsparameters (rechts) (schematisch) [4]

zu sehen. Für $T>T_2=T_C+\frac{1}{3}\frac{B^2}{aE}$ ist nur eine Phase stabil, zum Beispiel Phase I, natürlich mit $\phi=0$. Bei $T=T_2$ erscheint Phase II in einem metastabilen Zustand, der durch das zweite Minimum von $\Phi(\phi)$ verursacht wird. So bald die Temperatur sinkt, wächst die Stabilität von Phase II an. Phase I und Phase II befinden sich im Gleichgewicht, wenn die Gleichung $\Phi(\phi)=0$ erfüllt ist, z. B. bei $T_1=T_C+\frac{B^2}{4aE}$. Unter T_1 verliert Phase I immer mehr an Stabilität und bleibt im metastabilen Zustand bis α sein Vorzeichen für $T=T_C$ ändert. Der Übergang zeichnet sich durch einen Koexistenzbereich der beiden Phasen im Intervall

$$\triangle T=T_2-T_C=\frac{B^2}{3aE} \tag{2.50}$$

aus. Ansonsten sind die beiden Phasen metastabil für $T>T_1$ und $T<T_1$.

2.7 Skaleninvarianz

Die Tatsache, daß in makroskopische nahezu kritischen Systemen eine sehr große Anzahl von Freiheitsgeraden miteinander korreliert ist, macht das Studium von kontinuierlichen Phasenübergängen schwierig. Die Diskrepanz zwischen den präzisen kritischen Messungen und den Vorhersagen der klassischen Theorie machten die Entwicklung von neuen Methoden notwendig. Die neuen Methoden, die in den 60er und 70er Jahren insbesondere von Kadanoff und Wilson entwickelt wurden, stützen sich auf ein Gerüst von theoretischen Ideen, die alle unter dem Begriff der *Renormierungstheorie* oder *renormalization group* zusammengefasst sind.
Eine der grundlegenden Annahmen aus der Renormierungstheorie (kurz: RG) ist die Skalenhypothese bzw. die Hypothese der Skaleninvarianz. Widom hat unabhängig von Wilson als erster herausgefunden, daß, wenn man den Abstand vom kritischen Punkt variiert, die thermischen Funktionen ihre Maßeinheiten ändern, aber nicht ihre funktionale Form. Mathematisch bedeutet das Skalenverhalten, daß der singuläre Teil der thermischen Funktionen homogene Funktionen des Abstandes vom kritischen Punkt sind. Der mathematische Ausdruck für eine homogene Funktion mit m Variablen $(y_1, \ldots, y_m)$ ist:

$$f(\lambda^{a_1} y_1, \lambda^{a_2} y_2, \ldots, \lambda^{a_m} y_m) = \lambda^{a_f} f(y_1, \ldots, y_m), \tag{2.51}$$

für jede reelle positive Zahl $\lambda > 0$. In Gleichung (2.51) sind a_i Exponenten, die die Ordnung der Homogenität in Bezug auf jede Variable y_i beschreiben. Solche Funktionen besitzen eine Invarianz in Bezug auf die Skalentransformationen. Eine homogene Funktion mit zwei Variablen erfüllt folgende Ungleichung:

$$f(\lambda^p x, \lambda^q y) = \lambda f(x, y) \tag{2.52}$$

oder anders geschrieben

$$f(x, y) = y^{1/q} f(\frac{x}{y^{p/q}}, 1). \tag{2.53}$$

Diese spezielle Form erweist sich als sehr nützlich und auch notwendig für die phänomenologische Beschreibung der Potenzgesetzabhängigkeit der thermodynamischen Größen im kritischen Bereich. Wie wir bereits wissen, divergiert die Korrelationslänge ξ am kritischen Punkt. Solche Größen, deren Korrelationslänge unendlich groß wird, nennt man anomale fluktuierende Größen. Zu den anomalen fluktuierenden Größen gehört sicherlich auch der Ordnungsparameter ϕ. Allgemein existiert ein Satz von anomalen fluktuierenden Größen $A_i(\mathbf{x})$, die das System im Bereich des Phasenübergangs charakterisieren. Die Eigenschaften von Fluktuationen werden komplett beschrieben durch den Satz von Korrelationsfunktionen der Form

$$\langle A_i(\mathbf{x})\, A_k(\mathbf{x}) \rangle \ . \tag{2.54}$$

Man macht jetzt die Annahme, daß die Fluktuationsfelder keine andere räumliche charakteristische Länge als die Korrelationslänge ξ haben. Dann gilt am Übergangspunkt: Wenn man alle Längen mit demselben Faktor ändert, dann ist das gleichbedeutend mit dem Übergang zu einer anderen Maßeinheit. Deswegen ändern sich auch die Maßeinheiten der Felder $A_i(\mathbf{x})$. Folglich wird jede Größe $A(\mathbf{x})$ durch seine *Skalendimension* Δ_A in der Skalentransformation beschrieben:

$$A(b\mathbf{x}) \;\rightarrow\; b^{-\Delta_A}A(\mathbf{x}). \tag{2.55}$$

Dieses Transformationsgesetz stellt den Inhalt der Skalenhypothese oder Skaleninvarianz der Fluktuationen dar. Den Faktor b nennt man den Skalenfaktor. Es ist zu betonen, daß die Skalendimension Δ_A nicht gleichzusetzen ist mit der natürlichen Definition der räumlichen Dimension von A.
In allgemeinen ist die Dimension Δ_ϕ verknüpft mit dem kritischen Exponenten η:

$$\Delta_\phi = (d - 2 + \eta)/2. \tag{2.56}$$

Die Hypothese, daß die Korrelationsfunktionen eine skaleninvariante Form und, daß es Beziehungen zwischen ihren Dimensionen gibt, wurde zuerst von A. Z. Patashinskiĭ und V. L. Pokrovskiĭ vorgestellt. Eine phänomenologische Anwendung der Skalenhypothese wurde insbesondere L. P. Kadanoff entwickelt. Die Skalenhypothese hat wichtige Konsequenzen für die mikroskopische Berechnung der kritischen Exponenten. Aus der Skaleninvarianz folgt nämlich, daß die kritischen Exponenten unabhängig davon sind, ob man sich *von unten* ($T < T_C$) oder *von oben* ($T > T_C$) dem kritischen Punkt nähert.

2.8 Kritische Exponenten und die Skalengesetze

Bei Annäherung der Temperatur an den kritischen Punkt T_C zeigen thermodynamische Größen oft ein Potenzverhalten, das durch kritische Exponenten bestimmt ist. Zwischen ihnen kann man allgemein gültige Beziehungen ableiten, die sogenannten *Skalengesetze*. Das Potenzverhalten der kritischen Exponenten allgemein und die Skalengesetze werden in diesem Kapitel vorgestellt:
Hier für ist es nützlich die *reduzierte* Temperatur

$$\tau = \frac{T - T_C}{T_C} \tag{2.57}$$

einzuführen, die die Abstände von der kritischen Temperatur mißt. Nahe des kritischen Punktes kann der singuläre Teil einer thermodynamischen Funktion als homogene Funktion geschrieben werden:

$$f(\tau) = A\tau^\lambda(1 + B\tau^y + \dots), \tag{2.58}$$

wobei $y > 0$. Für $\tau \to 0$, d. h. $T \to T_C$, verschwinden alle Terme in der Klammer bis auf die 1, so daß $f(\tau)$ in unmittelbarer Nähe von T_C einem Potenzgesetz genügt. Das wird durch die Kurzschreibweise

$$f(\tau) \sim \tau^{\lambda} \tag{2.59}$$

ausgedrückt. Das Potenzverhalten von thermodynamischen Funktionen im kritischen Bereich ist nicht für alle Systeme typisch. Es gibt auch Ausnahmen. Zum Beispiel divergiert die Wärmekapazität des Ising-Modells logarithmisch. Deshalb definiert man allgemein für den kritischen Exponenten:

$$\lambda = \lim_{\tau\to 0} \frac{\ln f(\tau)}{\ln \tau}, \ (\tau > 0) \quad \text{und} \qquad \lambda' = \lim_{\tau\to 0} \frac{\ln f(\tau)}{\ln \tau}, \ (\tau < 0). \tag{2.60}$$

Wenn λ negativ ist, divergiert $f(\tau)$ am kritischen Punkt. Ist λ positiv, geht $f(\tau)$ am kritischen Punkt gegen Null. Unter Umständen könnte es wichtig sein, von welcher Seite man sich dem kritischen Punkt nähert, denn λ muß nicht unbedingt gleich λ' sein. Zum Beispiel sind die spezifische Wärme, die Suszeptibilität und die Korrelationslänge unterhalb und überhalb des Übergangspunktes definiert. Aus der Skalenhypothese folgt aber, daß die kritischen Exponenten auf beiden Seiten gleich groß sein sollten. Es gibt einen endlichen Satz von in der Nähe von T_C dominanten kritischen Exponenten, die wie folgt lauten:
Der Exponent α bestimmt die Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität :

$$C_p \sim |\tau|^{-\alpha}, \quad \tau > 0. \tag{2.61}$$

Der Exponent β beschreibt das Gesetz, nach dem der Gleichgewichtswert des Ordnungsparameters in der unsymmetrischen Phase gegen Null strebt:

$$\phi \sim (-\tau)^{\beta}, \quad \beta > 0, \quad \tau > 0. \tag{2.62}$$

Um die Abweichungen des Ordnungsparameter ϕ von seinem Mittelwert zu berechnen, werden zwei weitere Exponenten eingeführt. Der Exponent ν, der die Temperaturabhängigkeit der Korrelationslänge bestimmt:

$$\xi \sim |\tau|^{-\nu}, \quad \nu > 0, \tag{2.63}$$

und der Exponent η, mit dem die Korrelationsfunktion (2.18) bei $\tau = 0$ mit dem Abstand abnimmt:

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-(d-2+\eta)}, \quad \eta > 0, \tag{2.64}$$

dabei ist d die Raumdimension ($d = 3$ für übliche Systeme). Der Exponent η drückt aus, wie die Korrelationsfunktion eines realen Systems bei $T = T_C$ von der Formel (2.18) abweicht.

Wirkt auf das System ein äußeres Feld h, kommen entsprechend noch weitere Exponenten hinzu, je nachdem, ob das Feld *stark* oder eher *schwach* ist. Die Größe h ist die zu ϕ konjugierte Feldvariable.Wird das System durch ein schwaches Feld h beeinflußt, so beschreibt der Exponent γ die Änderung der Suszeptibilität (Kompressibilität bei Gasen):

$$\chi \sim |\tau|^{-\gamma}, \quad \gamma > 0. \tag{2.65}$$

Bei einem starken Feld h definieren die kritischen Exponenten ϵ, δ, μ die Abhängigkeit der thermodynamischen Größen und der Korrelationslänge von dem Feld h:

$$\begin{array}{lll} C_p & \sim & h^{-\epsilon} \\ \phi & \sim & h^{1/\delta} \quad ,\delta > 0 \\ \xi & \sim & h^{-\mu} \quad ,\mu > 0. \end{array} \tag{2.66}$$

Nun lassen sich aus diesen Definitionen fünf Beziehungen herleiten, die die acht Exponenten miteinander verknüpfen, die Skalengesetze:

$$\begin{array}{ll} (1) & \alpha + 2\beta + \gamma = 2 \\ (2) & \beta\delta = \beta + \gamma \\ (3) & \epsilon(\beta + \gamma) = \alpha \\ (4) & \mu(\beta + \gamma) = \nu \\ (5) & \nu(2 - \eta) = \gamma. \end{array} \tag{2.67}$$

Aus der Skalenhypothese und den Skalengesetzen folgt, daß man all diese Exponenten durch nur zwei unabhängige ausdrücken kann.

3 Systeme mit einem Ordnungs-Unordnungsübergang

Die theoretische Beschreibung von Phasenübergängen ist mit großen Schwierigkeiten verbunden. Die Wechselwirkungen, die zu Ordnungs-Unordnungsübergängen führen, sind zwar nicht trivial, aber doch in speziellen Fällen mathematisch behandelbar. In einigen Fällen können die thermodynamischen Eigenschaften solcher Systeme komplett berechnet werden, sogar im kritischen Bereich. Somit geben sie uns einen wichtigen Einblick in das Verhalten von Systemen nahe eines Phasenübergangs. Der Prototyp solcher Systeme ist das Ising-Modell.

3.1 Das Ising-Modell

Das Ising-Modell ist das mathematisch einfachste Modell, das die Methoden der statistischen Gleichgewichtsmechanik anwendet. Im Ising-Modell wird ein Gitter betrachtet, wobei jeder Gitterplatz eine von zwei möglichen Eigenschaften, A oder B, des Systems hat. Man nimmt an, daß die Gitterplätze mit ihren Eigenschaften nur mit ihrem nächsten Nachbar wechselwirken. Dann sei V_{AB} die Wechselwirkungsenergie zwischen den Objekten A und B und V_{AA} und V_{BB} die Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden Objekten A bzw. B. Man betrachtet das System zunächst bei der Nulltemperatur:

Abbildung 11: Gitter, dessen Plätze mit der Eigenschaft A oder B besetzt sind.

a) Wenn $V_{AB} > (V_{AA} + V_{BB})/2$, dann wird eine Konfiguration energetisch bevorzugt, in der jeweils nur die Objekte A miteinander und die Objekte B miteinander benachbart sind. In diesem Fall wird das Gitter in Bereiche aufgesplittet, in denen entweder nur die Objekte A oder B vorkommen.

b) Wenn $V_{AB} < (V_{AA} + V_{BB})/2$, dann wird energetisch diejenige Konfiguration bevorzugt, in der die Objekte A und B abwechselnd benachbart sind.

Bei den oben genannten Möglichkeiten handelt es sich um geordnete Zustände. Wenn man nun die Temperatur des Systems erhöht, dann bewirkt die thermische Energie k_BT eine zufällige Verteilung der Eigenschaften A und B auf dem Gitter. Ab einem „gewissen" Temperatur befindet sich das System in einem im Mittel ungeordneten Zustand. Die Zustandssumme für solch ein System nimmt dann folgende Form an:

$$\mathcal{Z}(T) = \sum_{\text{über alle Gitterkonfigurationen}} \exp\left(-\beta \sum_{\text{alle nächsten Nachbarn}} V_{ij}\right) \qquad (3.1)$$

β steht hier nicht für den kritischen Exponenten, sondern für den Boltzmann-Faktor $1/kT$. Das Ising-Modell (1925) war ursprünglich konzipiert, um einen Phasenübergang im Ferromagneten zu beschreiben. Mit geringfügigen Änderungen kann es

jedoch auch andere Phasenübergänge (z. B. Ordnung-Unordnungs-Übergänge in binären Legierungen) beschreiben.
Beim Ising-Modell des Ferromagneten liegt das magnetische Moment am Gitterplatz entweder in Feldrichtung oder entgegengesetzt, in binären Legierungen ist am Gitterplatz entweder die Atomsorte A oder B, beim Gittergas, einem Modell des realen Gases, ist der Gitterplatz entweder besetzt oder leer. Mit Hilfe des Ising-Modells werden Methoden und Näherungsverfahren zur Behandlung von Phasenübergängen für reale Stoffe bzw. komplizierte Modelle getestet und die physikalischen Eigenschaften in der Nähe der Umwandlungspunkte abgeschätzt. Weiterhin besitzt das Modell viele Anwendungen in modernen Fragestellungen der Vielteilchenphysik (z. B. Spingläser). Mit dem zweidimensionalen Ising-Modell wurde erstmalig gezeigt, daß man mit dem Formalismus der statistischen Physik Phasenübergänge exakt beschreiben kann. An jedem von N Gitterpunkten eines d-dimensionalen periodischen Gitters ($d = 1, 2, 3$) befindet sich ein permanentes magnetisches Moment

$$\mu_i = \mu\sigma_i, \tag{3.2}$$

mit der klassischen Spinvariablen $\sigma_i = \pm 1$ und $i = 1, 2, \ldots N$. Somit hat jedes magnetische Moment zwei Einstellungensmöglichkeiten zu einer ausgezeichneten Richtung. Die lokalen Momente wechselwirken miteinander, da sonst kein Phasenübergang zu erwarten wäre. Die Hamilton-Funktion des Ising-Modells lautet

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu B_0 \sum_i \sigma_i \ , \tag{3.3}$$

mit den Kopplungskonstanten J_{ij}. $\langle ij \rangle$ bedeutet die Summation über alle benachbarten Spins. Das Magnetfeld $\mathbf{B} = B_0\, \mathbf{e_z}$ definiert die z-Richtung, relativ zu der sich die magnetischen Momente parallel oder antiparallel ausrichten. Das eindimensionale ($d = 1$) Ising-Modell mit oder ohne Magnetfeld $\mathbf{B}$ läßt sich zwar exakt durchrechnen, falls sich die Wechselwirkung J_{ij} auf die nächsten Nachbarn beschränkt, aber es zeigt keinen Phasenübergang. Das zweidimensionale ($d = 2$) Ising-Modell ist für $\mathbf{B} = 0$ und nächstnachbar Wechselwirkung mathematisch streng behandelbar. 1944 veröffentlichte Lars Onsager 1944 [13] die erste exakte analytische Bestimmung der freien Energie eines zweidimensionalen Ising-Systems im Feld Null, und erst 1952 lieferte Yang [14] die Berechnung der spontanen Magnetisierung dieses Systems als Funktion der Temperatur.
Für das dreidimensionale ($d = 3$) Ising-Modell liegen nur Näherungsergebnisse vor, die mit Extrapolationsmethoden gewonnen wurden.

3.2 Reihenentwicklungen

Die Methoden der genauen Reihenentwicklungen waren und sind heute noch eine der nützlichsten 'Werkzeuge' bei der Untersuchung von Gittermodellen. Eine Übersicht

der verschiedenen Methoden findet man in der Buchreihe von Domb und Green [15]. Die meisten dieser ausgeklügelten Techniken wurden am Ising-Modell erprobt. Die Berechnung dieser Reihenentwicklungen erwies sich für dreidimensionale Modelle als äußerst schwierig. Anfängliche Methoden wie der direkte geometrische (Wakefield, [16], 1951) bzw. der indirekte kombinatorische Formalismus (Domb [17], 1960; Sykes et al, [18], 1960) führten schließlich zu den sogenannten 'star graph'-Entwicklungen (Sykes und Hunter, [19], 1974). Anstatt kombinatorischer Mittel werden heute vielmehr algebraische Methoden bei Reihenentwicklungen eingesetzt.
Es hat sich gezeigt, daß die Reihenentwicklungen in vielen Fällen einer der genauesten Methoden ist, die kritische Temperatur und die kritischen Exponenten abzuschätzen. Die Idee dabei ist, ein systematischen Weg zu finden, der die einzelnen Beiträge in der Zustandssumme berechnet, und man nimmt an, daß die aufeinanderfolgenden Approximationen extrapoliert werden können, um so an Informationen über das kritische Verhalten zu gelangen.
Dabei werden verschiedene Typen von Entwicklungen betrachtet. Die eine ist die Hochtemperaturentwicklung, wo der Boltzmannfaktor in Potenzen der inversen Temperatur entwickelt wird und die Spur Term für Term berechnet wird. Die andere Entwicklung ist die Tieftemperaturentwicklung. Hier werden nur die Konfigurationen berechnet, die dann an Bedeutung gewinnen, wenn die Temperatur von Null erhöht wird: Ausgehend vom Grundzustand wird die Reihe so konstruiert, indem man aufeinanderfolgende Terme mit 1, 2, 3, ... umgedrehten Spins hinzufügt. Je höher die Ordnung der Entwicklung ist, desto komplizierter und größer wird die Zahl der beitragenden Terme.

Wie wir später sehen werden, kann jeder Term in der Entwicklung als Graph auf dem Gitter dargestellt werden, d. h. man braucht nur die vorhandenen Graphen abzuzählen. Glücklicherweise vereinfacht sich das Verfahren dadurch, daß nur die Terme in der Zustandssumme beitragen, dessen Graph "zulässig" ist. Es stellt sich nun die Frage, wie man aus den beiden Entwicklungen den kritischen Punkt bestimmen kann. Die Idee ist folgende:
Man hofft, daß beide Reihen durch eine Singularität einen endlichen Konvergenzradius in der komplexen Ebene haben. Liegen diese Singularitäten auf der reellen Achse und nimmt man an, daß nur *ein* kritischer Punkt existiert, dann müssen die Singularitäten ein und denselben Punkt, den kritischen Punkt nämlich, beschreiben. Durch diese Methode konnten die kritischen Temperaturen für viele zweidimensionale Systeme gefunden werden. Die Reihenentwicklungen für dreidimensionale Systeme sind viel komplizierter und mit einem großen numerischen Aufwand verbunden. Bis heute konnte z. B. das dreidimensionale Ising-Modell noch nicht exakt gelöst werden.

3.2.1 Hochtemperaturentwicklung des zweidimensionalen Ising-Modells

Wir wollen zunächst die Hochtemperaturentwicklung des zweidimensionalen Ising-Modells mit verschwindenden Magnetfeld, $H = 0$, auf einem quadratischen Gitter betrachten. Auch wenn das Ising-Modell, die physikalischen Systeme, die es repräsentieren soll, stark vereinfacht, so veranschaulicht es doch die wichtigsten Ideen, die hinter der Konstruktion von Reihenentwicklungen stecken.

Die Zustandssumme des Ising-Modells lautet [20]:

$$\mathcal{Z}(T, H=0) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j\right), \quad \text{mit } K = \frac{J}{kT}\,. \tag{3.4}$$

$\{\sigma\}$ bedeutet die Summation über alle Konfigurationen. Da für das Ising-Modell $\sigma_i \sigma_j = \pm 1$ gilt, und unter Verwendung der Formel

$$e^{A\sigma_i} = \cosh A\,(1 + \sigma_i\, \tanh A)\,, \tag{3.5}$$

kann man den geklammerten Term in Gleichung (3.4) umschreiben in

$$e^{K\sigma_i\sigma_j} = \cosh K(1 + \sigma_i\sigma_j v)\,, \tag{3.6}$$

wobei $v = \tanh K$ der Entwicklungsparameter für die Hochtemperaturentwicklung ist: Wenn $v \longrightarrow 0$, dann $T \longrightarrow \infty$. Mit Gleichung (3.6) kann man die Zustandssumme umformen und in einer Potenzreihe von v entwickeln:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{K\sigma_i\sigma_j} && (3.7)\\
&= (\cosh K)^{\mathcal{P}} \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + \sigma_i\sigma_j v) && (3.8)\\
&= (\cosh K)^{\mathcal{P}} \sum_{\{\sigma\}} \Big(1 + v \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i\sigma_j + v^2 \sum_{\langle i,j \rangle \langle k,l \rangle} \sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l + \dots\Big)\,, && (3.9)
\end{aligned}$$

wobei $\mathcal{P}$ die Anzahl der Linien auf dem Gitter ist. Für ein Gitter mit γ nächsten Nachbarn ist $\mathcal{P} = N\gamma/2$. Das Ziel ist jetzt, die Anzahl der Beiträge mit der Ordnung v^n in der Zustandssumme abzuzählen, d. h. man betrachtet die entsprechenden Graphen auf dem Gitter. Jedes Produkt eines Spinpaares, $\sigma_i\sigma_j$, kann mit einer Linie auf dem Gitter assoziert werden, die die Plätze i und j verbindet. Jeder Term der Ordnung v kann durch eine einzelne Linie dargestellt werden. Terme der Ordnung v^2 entsprechen 2 Linien, die sich treffen können oder auch nicht. Jeder Term der Ordnung v^n stellt also eine Graphen mit n-Ecken auf dem quadratischen Gitter dar. Einige Beispiele sind in der Abbildung 12 zusehen.

Abbildung 12: Verschiedenen Graphen auf einem quadratische Gitter, von denen jeder einem Produkt von Spins entspricht: (a) $\sigma_l \sigma_m$, (b) $\sigma_l \sigma_m \sigma_j \sigma_k$, (c) $\sigma_i \sigma_l^2 \sigma_m$, (d) $\sigma_i^2 \sigma_j^2 \sigma_l^2 \sigma_m^2$, (e) $\sigma_i^2 \sigma_j^3 \sigma_k^2 \sigma_l^3 \sigma_m^3 \sigma_n^2 \sigma_o$, (f) $\sigma_i^2 \sigma_j^2 \sigma_l^2 \sigma_m^4 \sigma_n^2 \sigma_p^2 \sigma_q^2$ [21]

Da $\sigma_i = \pm 1$, gilt

$$\sum_{\sigma} (\sigma_i^{n_i}\, \sigma_j^{n_j}\, \sigma_k^{n_k}\, \ldots) = \begin{cases} 2^N & \text{, wenn alle } n_i \text{ gerade,} \\ 0 & \text{, sonst,} \end{cases} \tag{3.10}$$

wobei N die Zahl der Spins auf dem Gitter ist. Es sind also nur bestimmte Graphen, die einen nichtverschwindenen Beitrag zur Zustandssumme liefern. Graphisch bedeutet dies, daß nur geschlossene Schleifen, jeweils mit einem Boltzmann-Gewicht von 2^N, einen Beitrag zu Z leisten. Somit reduziert sich die Berechnung der Zustandssumme auf das Problem, geschlossene Schleifen auf einem quadratischen Gitter abzuzählen. Der erste Term, der zu Z beiträgt, hat die Ordnung v^4:

$$v^4 : \overbrace{\sigma_1 \underbrace{\sigma_2 \sigma_2} \underbrace{\sigma_3 \sigma_3} \underbrace{\sigma_4 \sigma_4} \sigma_1}^{\text{Schleife}}$$

Der entsprechende Graph ist ein Viereck (siehe Abbilung 12(d)). Abbildung 13 zeigt die möglichen Schleifen bis Ordnung v^{10}.

Abbildung 13: Graphen und ihre Anzahl in der Hochtemperaturentwicklung [21]

Demnach lauten die ersten Terme der Zustandssumme:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}(v) &= (\cosh K)^{\mathcal{P}}\, 2^{N}\, \{1 + Nv^4 + 2Nv^6 + \frac{1}{2}N(N+9)v^8 \\ &\quad + 2N(N+6)v^{1}0 + \mathcal{O}(v^{12})\} \\ &= (\cosh K)^{\mathcal{P}}\, 2^{N} \sum_{l=0}^{\mathcal{P}} g(l)v^{l} \;,\end{aligned} \tag{3.11}$$

wobei $g(l)$ die Schleifen der Länge l auf dem Gitter sind. Für das zweidimensionale Ising-Modell ohne Magnetfeld lassen sich alle Ordnungen in v benennen. Vom größeren Interesse sind aber die dreidimensionalen Modelle, wo man noch lange nicht alle Terme der beiden Entwicklungen berechnet hat. Zu diesem Zeitpunkt ist die Berechnung der Suszeptibilitätsreihe für das dreidimensionale Ising-Modell bis zur Ordnung v^{21} und für die spezifische Wärmekapazitätsreihe bis zur Ordnung v^{14} komplett. Die Werte für die kritischen Exponenten und für die kritische Temperatur sind bis zur 13. Dezimalstelle bzw. bis zur 4. Dezimalstelle bekannt (Zeitpunkt 1992).
Aus der Zustandssumme erhält man weitere Eigenschaften, wie freie Energie und

spezifische Wärme. Wenn ein magnetisches Feld in die Hamiltonfunktion eingefügt wird, was zur einer Lockerung der Einschränkung der geraden Vertices führt, dann können entsprechend die Suszeptibilitätsreihen konstruiert werden. Ebenso ist es möglich, die Korrelationsfunktion in einer Reihe zu entwickeln.

3.2.2 Tieftemperaturentwicklung des zweidimensionalen Ising-Modells

Hochtemperaturentwicklungen liefern natürlich keine Informationen über Eigenschaften unter der kritischen Temperatur. Um nun aber ein komplettes Bild vom Ising-Modell zu erhalten, braucht man die Tieftemperaturentwicklung. Hierbei wird um den Zustand der vollständigen Ausrichtung aller Spins entwickelt [20]:
Mit $e^{K\sigma_i\sigma_j} = \cosh K + \sigma_i\sigma_j \sinh K$ läßt sich die Zustandssumme (3.4) umschreiben zu

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{\langle i,j \rangle} (\cosh K + \sigma_i\sigma_j \sinh K) \\ = & (e^K)^{\mathcal{P}} \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle i,j \rangle} \left(\frac{1+\sigma_i\sigma_j}{2} + \frac{(1-\sigma_i\sigma_j)e^{-2K}}{2} \right) \end{aligned} \tag{3.12}$$

Der erste Term in der Klammer liefert bei kleinen T nur für $\sigma_i\sigma_j = +1$ einen Beitrag zur Zustandssumme. Der zweite Term in der Klammer gibt nur einen Beitrag für gedrehte Spins. Flippt in dem Ising-System ein Spin, so bedeutet das graphisch, daß dessen Verbindungslinie zum benachbarten Spin gebrochen ist und durch eine Linie quer zur ursprünglichen Verbindungslinie angedeutet wird. Die so neu entstandene Linie hat, relativ zum Grundzustand, eine Energie von $2K$ und somit ein Boltzmann-Gewicht von

$$u = e^{-2K} . \tag{3.13}$$

u stellt den Entwicklungsparameter der Tieftemperaturentwicklung dar. Der graphische Weg, die beitragenden Graphen abzuzählen, verläuft analog zu dem der Hochtemperaturentwicklung.
Bei der niedrigsten Anregung, wenn also ein Spin gedreht ist, werden vier Verbindungslinien (allgemein γ Verbindungslinien) gebrochen. Der Entwicklungsparameter für einen geflippten Spin hat die Ordnung 4:

$$e^{-4\cdot 2K} = e^{-8K} = u^4 \tag{3.14}$$

Wenn zwei Spins geflippt sind, dann sind sechs Verbindungslinien gebrochen, wenn diese Spins nächste Nachbarn sind, ansonsten sind es acht Verbindungslinien. Die entsprechenden Boltzmann-Gewichte sind:

$$e^{-6\cdot 2K} = e^{-12K} = u^6 \quad \text{und} \quad e^{-8\cdot 2K} = e^{-16K} = u^8 \tag{3.15}$$

Die dazugehörigen Graphen und ihre Häufigkeiten im Gitter sind bis Ordnung 8 in Abbildung 14 dargestellt. Die angegebenen Terme sind die ersten Terme der Tieftemperaturentwicklung:

$$\mathcal{Z}(u) = e^{2NK} \left(1 + Nu^4 + 2Nu^6 + \frac{1}{2}N(N+9)u^8 + \mathcal{O}(u^{10}) \right) . \tag{3.16}$$

Abbildung 14: Graphen und ihre Anzahl in der Tieftemperaturentwicklung [21]

3.2.3 Die Selbstdualität des zweidimensionalen Ising-Modells

Für das zweidimensionale Ising-Modell kann die Zustandssumme der Hochtemperaturphase durch eine Dualtitätsrelation mit der Tieftemperatur in Beziehung gesetzt werden:

$$\frac{\mathcal{Z}_N(v)}{2^N\,(\cosh K)^{2N}} = \frac{\mathcal{Z}_N(u)}{e^{-2NK}}\,. \tag{3.17}$$

Das Gitter der Tieftemperaturphase ist das duale Gitter der Hochtemperaturphase, dessen Gitterplätze in der Mitte der ursprünglichen Gitterquadrate liegen.
Definiert man K^* durch $\tanh K = e^{-2K^*}$ oder $e^{K^*}(e^K - e^{-K}) = (e^K + e^{-K})e^{-K^*}$, so erhält man:

$$\sinh(2K)\,\sinh(2K^*) = 1 \tag{3.18}$$

Die Formel (3.18) ist die Gleichung für die kritische Kurve, die die geordnete (ferromagnetische) Phase und die ungeordnete (paramagnetische) Phase voneinander trennt. Mit (3.18) lautet dann die Dualtitätsbeziehung (3.17):

$$\frac{\mathcal{Z}_N(K)}{\sinh^{N/2}(2K)} = \frac{\mathcal{Z}_N(K^*)}{\sinh^{N/2}(2K^*)} \tag{3.19}$$

Man nennt K^* die zu K duale Temperatur. Unter der Annahme, daß nur *ein* kritischer Punkt existiert, ergibt sich aus der Dualität des Ising-Modells, daß das System nur bei $K = K^*$, d. h. wenn $\sinh^2(2K) = 1$, einen kritischen Punkt haben kann. Am Phasenübergangspunkt K_c ist das Modell selbstdual und es gilt

$$2K_c = \log(1+\sqrt{2}). \tag{3.20}$$

3.3 Das Potts-Modell

Das Potts-Modell ist eine Verallgemeinerung des Ising-Modells, in dem die Gitterplätze anstatt zwei q verschiedene Werte annehmen können. C. Domb [22] schlug das Modell damals seinem Studenten R. B. Potts als Thema für seine Forschungsarbeiten vor. Seit dem trägt es den Namen *Potts-Modell* oder *q-Zustand-Potts-Modell.*
Potts betrachtete das System mit Hilfe der Transfer-Matrix-Methode und entdeckte für den Fall eines ebenen quadratischen Gitters eine Dualitätstransformation, die die Tieftemperaturphase in die Hochtemperaturphase und umgekehrt abbildet [23]. Durch diese Methode konnte er den Phasenübergangspunkt, den kritischen Punkt, bestimmen. Das Problem wurde ebenso von Kihara et al [24] zwei Jahre später in einer unabhängigen Studie betrachtet. Kihara entwickelte eine graphische Ableitung der Dualitätsbeziehung.
Dem Problem wurde damals nur wenig Beachtung geschenkt. Aber in den 70er und 80er Jahren stieg das Interesse besonders an, als man herausfand, daß viele in der Natur vorkommende Systeme sich mit dem Potts-Modell beschreiben ließen.
Baxter hat 1973 gezeigt, daß das q-Zustands-Potts-Modell zu seinem definierten 6-Vertex-Modell äquivalent ist [25]. Durch die bekannten Eigenschaften des letzteren

Modells konnte er den kritischen Punkt, die freie Energie und die latente Wärme des Potts-Modells berechnen und folgerte aus den Ergebnissen, daß das zweidimensionale Potts-Modell für $q > 4$ einen Phasenübergang erster Art hat. Für $q \leqslant 4$ treten nur kontinuierliche Phasenübergänge auf. Nicht alle Methoden führen auf dieses Ergebnis. Die Berechnung des q-Zustands-Potts-Modells ergab in der Molekularfeldnäherung für $q \geqslant 3$ einen Phasenübergang erster Art. Mittag und Stephen fanden heraus, daß für genügend große q die Ergebnisse der Molekularfeldnäherung mit allen bekannten exakten Ergebnissen des Potts-Modells in zwei Dimensionen übereinstimmten [26].
Nienhaus et al gelang es als erster die Renormierungstheorie erfolgreich auf das Potts-Modell anzuwenden (siehe bei [27] und [28]). Die Art des Phasenüberganges hängt nicht nur vom Parameter q, sondern auch von der Raumdimension d ab: Das Pottsmodell zeigt einen Phasenübergang erster Art für $q > q_c$ und zweiter Ordnung für $q \leqslant q_c$ am sogenannten Phasenübergangspunkt K_c. Der kritische Parameter q_c ist in zwei Dimensionen $q_c = 4$ und in drei Dimensionen gilt $2 < q_c < 3$.
Das Potts-Modell ist ein Gitter-Spin-System, in dem ein Spin an jedem Gitterplatz in eine von q gleichberechtigten Richtungen zeigen kann, die durch die folgenden ebenen Winkel festgelegt sind:

$$\Theta_n = 2\pi n/q\,, \qquad n = 0, 1, \dots, q-1. \tag{3.21}$$

Die einfachste Version der Wechselwirkung zwischen den Spins ist, wenn die Wechselwirkung nur vom nächsten Nachbar und von dem relativen Winkel zwischen den beiden ausgerichteten Spins abhängt. Die Hamiltonfunktion lautet dann:

$$-\beta\,\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J(\Theta_{ij})\,, \tag{3.22}$$

wobei $\Theta_{ij} = \Theta_{ni} - \Theta_{nj}$ der Winkel zwischen den benachbarten Spins ist. Die Funktion $J(\Theta)$ hat die Periode 2π. Diese Hamiltonfunktion ist äquivalent zu der eines Systems mit Z_q-Symmetrie [28].
Allgemein läßt sich die Wechselwirkungsenergie $J(\Theta)$ ausdrücken als

$$J(\Theta_{ij}) = \epsilon_2 \delta(s_i, s_j)\,, \tag{3.23}$$

wobei $\delta(s_i, s_j)$ für das Kronecker-Symbol steht. Dann ist $J(\Theta_{ij}) = \epsilon_2$ die Wechselwirkungsenergie, wenn sich die nächstbenachbarten Spins im selben Zustand befinden, und $J(\Theta_{ij}) = 0$, wenn sie verschiedene Zustände haben. Das System verhält sich ferromagnetisch, wenn $\epsilon_2 < 0$ ist. Die Hamiltonfunktion des *Standard-Potts-Modell* lautet dann

$$-\beta\,\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} \epsilon_2\, \delta(s_i, s_j). \tag{3.24}$$

Domb und Potts haben damals das sogenannte planare Modell betrachtet, indem der Wechselwirkungsenergieterm folgende Form hatte:

$$J(\Theta) = -\epsilon_1 \cos \Theta. \tag{3.25}$$

In der neueren Literatur ist es unter den Namen *clock-Modell* bekannt. Das planare und das Standard-Potts-Modell sind für $q = 2$ und $q = 3$ mit $\epsilon_2 = 2\epsilon_1$ bzw. $\epsilon_2 = 3\epsilon_1/2$ identisch. Eine andere äquivalente Darstellung der Spinzustände, die sogenannte "Simplex-Darstellung", ergibt sich aus dem Ansatz $s_i \in \{\boldsymbol{e}_i, i = 0 \ldots q{-}1\}$ mit

$$\delta(s_i, s_j) = \frac{1}{q}\left[1 + (q-1)\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j\right] . \tag{3.26}$$

$\boldsymbol{e}_i$ sind die q Einheitsvektoren, die in die q Symmetrierichtungen eines Hypertetraeders in $q-1$ Dimensionen zeigen. Die Vektoren sind für die Fälle $q = 2, 3, 4$ in Abbildung 15 zusehen. Im $q = 3$-Potts-Modell lassen sich die Potts-Zustände damit

Abbildung 15: Die q Einheitsvektoren zeigen in die q symmetrischen Richtungen eines Hypertetraeders in $q-1$ Dimensionen [29].

in der Form

$$\boldsymbol{e}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \; ; \; \boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \; ; \; \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} -1/2 \\ -\sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \tag{3.27}$$

darstellen. Aus den Definitionen ergibt sich unmittelbar, daß das $q = 2$ Potts-Modell äquivalent zum Ising-Modell ist. Während das Ising-Modell aber eine Spin-Inversionssymmetrie $s_i \to -s_i$ besitzt, ist die Hamiltonfunktion für $q > 2$ nur invariant gegenüber Permutationen in der Bezeichnung der Spin-Zustände (=Z_3-Symmetrie). Eine Untergruppe der Permutationsgruppe sind die zyklischen Vertauschungen: In der Simplex-Darstellung entsprechen diese einer Rotation um diskrete Winkel. Damit steht das Potts-Modell bezüglich der Symmetrie-Eigenschaften zwischen dem Ising-Modell und den Modellen mit einer kontinuierlichen Rotationssymmetrie wie z. B. dem XY-Modell oder dem Heisenberg-Modell. Für $q = 3$ erhält man das *3-Zustands-Potts-Modell*, das in den folgenden Kapiteln in näher betrachtet wird. Das Modell für $q = 4$ wurde damals als erstes von Ashkin und Teller (1943) untersucht und wird daher heute als *Ashkin-Teller-Modell* bezeichnet. Durch die Matrixmethode von Kramer-Wannier und unter der Annahme, daß nur ein Übergang existiert, war Potts in der Lage den kritische Temperatur für $q = 2, 3, 4$ in einem quadratischen Gitter zu bestimmen:

$$K_c = ln(1 + \sqrt{q}). \tag{3.28}$$

Wenn $q = 1$ ist, dann beschreibt das Modell eine Perkolation und für $q = 0$ ein statistisches Netzwerk.

3.4 Experimentelle Beispiele

Das Interesse am Potts-Modell hat in den letzten Jahren immer mehr zugenommen, nachdem man erkannt hatte, daß viele in der Natur vorkommende Systeme sich durch das Potts-Modell beschreiben lassen.
In den 70er Jahren begann man damit diese natürlichen Systeme, die sich durch das Potts-Modell beschreiben ließen, in Universaltitätsklassen einzuordnen. Diese Katalogisierung ist in erster Linie Domany und seinen Mitarbeitern zu verdanken, der insbesondere inkommensurable und kommensurable Phasenübergänge im Zusammenhang mit Potts-Modellen genauer untersucht hat. Domany machte den Vorschlag, daß Monoschichten von, zum Beispiel, Edelgasatomen, adsorbiert auf einer Kristalloberfläche, sich durch das Potts-Modell beschreiben lassen [30]. Die Universalitätsklassen unterscheiden sich durch den Wert von q und der Dimension d des betrachteten Systems.

1. $q = 2$ (Ising-)Systeme

Viele magnetische Substanzen, wie $CoCs_2Br_5$ in $d = 2$, $CoCs_3Cl_5$ und $DyPO_4$ in $d = 3$, lassen sich durch einfache Ising-Systeme beschreiben. Domany und Schick schlugen ein System vor, indem ein honigwaben-angeordnetes Substrat mit dem Adsorbat halb überdeckt ist, zum Beispiel ^{4}He-Atome auf Krypton vorplattiertem Graphit [31].

2. $q = 3$ Systeme

Eine mögliche Realisierung des 3-Zustands-Modells wäre ein kubischer Ferromagnet mit drei einfachen Achsen in einem diagonal angelegten Magnetfeld. Alexander wies als erster auf den Zusammenhang adsorbierter Monoschichten in zweidimensionalen $q=3$ - Systemen und dem 3-Zustands-Potts-Modell hin [32]. Wie beim Ising-Modell stellt die Adsorbtion von He^4-Atomen auf Graphit, diesmal bei einer ein Drittel Überdeckung, eine Realisierung des Potts-Modells für $q = 3$ dar. Ein weiteres Beispiel wäre die strukturelle Anordnung in Silber-β-Aluminium.

3. $q = 4$ Systeme

Auch für $q = 4$ hat man zahlreiche adsorbierende Systeme in zwei Dimensionen gefunden. N_2 auf Krypton plattiertem Graphit oder O_2, adsorbiert auf einer Nickeloberfläche, zeigen dasselbe kritische Verhalten wie ein $q=4$-Modell.

4. $0 \leq q \leq 1$ Systeme

In dieser Klasse spielen Polymersysteme eine wichtige Rolle. Phasenübergänge in Gelierungs- und Vulkanisierungsprozessen von verzweigten Polymeren sind in derselben Universalitätsklasse wie die des Potts-Modells für $0 \leq q \leq 1$. Um die Theorie der Perkolation zu verstehen, betrachten wird ein einfaches Beispiel. Ein quadratisches Gitter wird durch miteinander verlötete metallische Drähte zusammengehalten. In dieses geordnete Gebilde bringen wir jetzt Unordnung, in dem wir der Reihe nach, aber zufällig, Bindungen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit q durchtrennen.
Dies kann man zum Beispiel mit Hilfe eines Computers mit einem Zufallsgenerator geschehen, der uns für jede Bindung im Gitter eine Zahl zwischen 0 und 1 liefert. Wenn diese kleiner als die vorgebenene Wahrscheinlichkeit q ist, wird die Bindung durchtrennt, ansonsten bleibt sie bestehen. Per Definition is die Wahrscheinlichkeit p, daß eine Bindung nach dieser Prozedur noch intakt ist, gleich $1 - q$.
Wenn $p = 1$ ist, dann ist das quadratische Gitter ein geordnetes Netzwerk. Falls nur wenige Bindungen durchtrennt sind - etwa für $p > \frac{1}{2}$ -, ist das metallische Netzwerk ein guter elektrischer Leiter. Es gibt noch genügend viele leitende Verbindungen, sogenannnte Cluster, zwischen den gegenüberliegenden Seiten des Gitters. Wenn man dort eine Spannung anlegen würde, dann würde Strom fließen. Wenn aber sehr viele Bindungen durchbrochen sind, dann wird das Netzwerk zum Isolator. Irgendwo zwischen den beiden Konzentrationen $0 < p < 1$ gibt es eine Schwellenkonzentration, bei der gerade noch eine leitende Verbindung zwischen den gegeüberliegenden Seiten des Gitters existiert, und Strom von einem Ende des Systems zum anderen perkolieren kann. Diese Konzentration wird Perkolationsschwelle oder kritische Konzentration p_c genannt. Sie trennt zwei Phasen mit unterschiedlichen Eigenschaften (in unserem Beispiel leitend und nichtleitend) voneinander.
Die kritischen Konzentration hängt vom Gittertyp ab. Für das quadratische Gitter, zum Beispiel, ist $p_c = \frac{1}{2}$, für das Dreieckgitter mit sechs statt vier Bindungen, ist p_c erheblich kleiner. Die kritische Konzentration is natürlich nur für unendlich große Systeme scharf definiert. Das obige Beispiel beschreibt den Fall der 'Bindungsperkolation'. Eine andere Möglichkeit der Perkolation ist die 'Platzperkolation', in denen die Gitterplätze zufällig 'besetzt' oder 'unbesetzt' sind, mit einer Wahrscheinlichkeit p, das ein gegebener Gitterplatz besetzt ist. In Analogie zur Theorie der Phasenübergänge weist auch die Perkolationstheorie auf universelle Gesetzmäßigkeiten hin. Man kann auch hier kritische Exponenten und Skalengesetze definieren, die nur von der Raumdimension d des Gitters abhängen, aber nicht vom jeweili-

gen Gittertyp. Fortuin und Kasteleyn [33] haben gezeigt, daß die Perkolation dem q-Zustands-Potts-Modell mit $q \to 1$ entspricht. Der Zusammenhang zwischen der Perkolation und dem ferromagnetischen Potts-Modell ist folgender:

$$(p - p_c) \longleftrightarrow (T_c - T)$$

3.5 Die Molekularfeld-Theorie des 3-Zustands-Potts-Modells

Die Molekularfeldtheorie liefert eine gute Beschreibung des Phasenübergangs in zwei oder höheren Dimensionen, wenn der Wert für q groß genug ist, d. h. etwa $q \geq 8$. Für $q \geq 3$ findet man in dieser Theorie Übergänge erster Art. Die Molekularfeldergebnisse stimmen mit allen bekannten und exakten Ergebnissen für das Potts-Modell auf einem ebenen Gitter überein, solange q genügend groß ist. In diesem Abschnitt soll nun die Landau-Theorie des Potts-Modells für $q = 3$ untersucht werden [34]. Sei nun n_k der Bruchteil der Gitterplätze, die sich im k-ten Zustand befinden. Man sucht nun einen geeigneten Ordnungsparameter, der zwischen Hoch- und Tieftemperaturphase unterscheidet. Bei hoher Temperatur sollten alle Zustände mit gleicher Wahrscheinlichkeit besetzt sein, d. h. $\langle n_k \rangle = 1/3$ für $k = 1, 2, 3$ ist. Die Abweichung vom Mittelwert ist demnach

$$m_k = n_k - \frac{1}{3}, \qquad k = 1,\, 2,\, 3\,. \tag{3.29}$$

Bei tiefen Temperaturen wird die Energie, die durch die Hamiltonfunktion definiert ist, minimal, wenn alle Spins an den Gitterplätzen gleichorientiert sind, sich also in einer der k Zustände befinden. Bei $T = 0$ ist die Hamiltonfunktion dreifach entartet, weil es drei äquivalente Grundzustände gibt. Da einer der k Zustände in der Tieftemperaturphase bevorzugt wird, ist $m_k \neq 0$ und m_1, m_2, m_3 eignen sich deshalb als Ordnungsparameter. Da $\sum \langle n_k \rangle = 1$, sind m_1, m_2 und m_3 nicht unabhängig voneinander, d. h.

$$m_1 + m_2 + m_3 = 0\,. \tag{3.30}$$

In diesem Fall ist der Ordnungsparameter zweidimensional. Eine geeignete Definition wäre:

$$M = \frac{1}{2}\sqrt{3}\, m_1 \quad \text{und} \quad Q = \frac{1}{2}(m_2 - m_3)\,. \tag{3.31}$$

Wegen der Symmetrie des Systems unter allen Wechselwirkungen $m_k \longleftrightarrow m_j$ und der Bedingung (3.30) muß die Landau-Entwicklung des Potts-Modells bis zur vierten Ordnung folgendermaßen aussehen [5]:

$$\Phi = \Phi_0(T) + r(m_1^2 + m_2^2 + m_3^2) + v m_1 m_2 m_3 + u(m_1^2 + m_2^2 + m_3^2)^2 + \ldots\,. \tag{3.32}$$

[5] Andere kubische Terme, wie $\sum_{j \neq k} m_j^2 m_k$, sind einfach zu $m_1 m_2 m_3$ proportional.

Umgeformt lautet Gleichung (3.32) mit den unabhängigen orthogonalen Variablen M und Q:

$$\Phi = \Phi_0 + r(M^2 + Q^2) - v'\, M(M^2 - 3Q^2) + u(M^2 + Q^2)^2 + \dots\,, \tag{3.33}$$

wobei $v' = 2 \cdot 3^{-3/2}\, v$ ist. M stellt einen magnetischen Dipol und Q einen Quadrupol dar. Die Untersuchung des Potentials ist einfach eine Kurvendiskussion im Zweidimensionalen mit den Parametern r, v' und u:

Auf den ersten Blick erkennt man gleich, daß das Potential Φ für $v' = 0$ rotationssymmetrisch ist, und somit zum Beispiel ein 'XY' oder 'planaren' Ferromagneten beschreiben kann (siehe Abbildung 16). Wenn r durch den Nullpunkt verläuft, erhält

Abbildung 16: Potential Φ für $r = 0$, $v' = 0$, $u = 0.5$

man einen Phasenübergang zweiter Art. Um nun aber die dreifache Entartung der Hamiltonfunktion des Potts-Modells zu zeigen, muß entweder v' ungleich Null sein oder man muß Potenzen 6. Ordnung und höher im Potential mit einbeziehen. In unserer Betrachtung soll $v' > 0$ sein. Für $v' > 0$ und $r = 0$ hat das Potential drei symmetrische Minima, die auf den Kurven $M = 0, \pm\sqrt{3}\,Q$ liegen (siehe nächste Seite, Abbildung 17). Für negatives r wandern diese Minima vom Ursprung weg und gehen immer mehr in die „Tiefe“. Auf der nächsten Seite ist in Abbildung 17a Φ für $r = -1, -5, -10$ und -30 abgebildet.

Abbildung 17: Potential Φ für $r = 0$, $v' = 2$, $u = 0.5$

Abbildung 17a: Potential Φ für $r = -1$, -5, -10 und -30

Für immer größer werdendes positives r laufen die drei Minima in ein metastabiles Minimum am Ursprung $M = Q = 0$ zusammen:

Abbildung 17b: Potential Φ für $r = 1$, 5 und 20

Die drei symmetrischen Minima des Potentials Φ findet man für $Q = 0$. In der unteren Abbildung 17c ist das Potential für $r_1 = \frac{9v'^2}{32u}$ und $r > r_1$ skizziert.

Abbildung 17c: Potenial für $r_1 = \frac{9}{4}$ (linke Seite) und $r = 3 > r_1$ (rechte Seite)

In der linken Zeichnung ist zusehen, daß das Potential für r_1 bei $M = \frac{3v'}{8u}$ einen Sattelpunkt hat. Diese Minima können also nur existieren, wenn $r < r_1 = \frac{9v'^{\,2}}{32u}$ und $M > \frac{3v'}{8u}$ ist. Wenn $r_0 = \frac{v'^{\,2}}{4u} < r < r_1$ ist, dann liegen diese Minima höher als das im Ursprung (siehe linkes Bild in Abbildung 17d).

Abbildung 17d: Potenial für $r_0 < r = 2.15 < r_1$ (links) und $r = r_0$ (rechts)

Diese 'stabilen' Minima verschieben sich aber diskontinuierlich zum Ursprung $M = Q = 0$, sobald r größer als r_1 (siehe Abbildung 17c, rechtes Bild). In diesem Punkt sind alle drei Zustände gleichwahrscheinlich: $n_k = 1/3$. Man würde keine abnorm große oder kritische Fluktuationen erwarten: $m_k = 0$ für $k = 1, 2, 3$. Das Potential wird für $r = r_0$ bei $M = \frac{v'}{2u}$ minimal wie am Ursprung (siehe Abbildung 17d, rechtes Bild). Man findet also einen Phasenübergang erster Art bei $r(T_0) = r_0$ vom geordneten zu einen der drei symmterischen k Zustände, der durch einen Sprung der Magnetisierung der Größe $\Delta M = \frac{v'}{2u}$ charakterisiert ist. Der Übergangspunkt stellt einen Quadrupol dar, in dem die 4 Tripelpunktlinien und die 6 Koexistenzflächen aufeinander treffen. Auf den Koexistenzflächen können jeweils zwei Phasen, wie zum Beispiel die Phasen im Zustand $k = 1$ und $k = 2$, oder die Phase im Zustand 2 und

Abbildung 18: Phasendiagramm des 3-Zustands-Potts-Modells in der Landau-Theorie [34]

die ungeordnete Phase, gleichzeitig existieren. Abbildung 18 stellt ein Phasendiagramm des 3-Zustands-Potts-Modells in der Landau-Theorie dar. h_1, h_2, h_3 sind drei äußere Felder, die jeweils die verschiedenen Zustände beeinflussen. Demnach müßte man zur Hamiltonfunktion mit N-Gitterplätzen den Term

$$-N(h_1 n_1 + h_2 n_2 + h_3 n_3) \tag{3.34}$$

hinzufügen. Da das Modell durch die Bedingung

$$n_1 + n_2 + n_3 = 1 \tag{3.35}$$

eingeschränkt ist, sind nur die Abweichungen zwischen den äußeren Feldern, $h_1 - h_3$ und $h_2 - h_3$, relevant für die thermodynamischen Eigenschaften. Dadurch müßte man $h_3 = 0$ setzen. Auf der anderen Seite bleibt die Symmetrie der Hamiltonfunktion erhalten, wenn alle man drei Felder beibehält unter der Bedingung, daß

$$h_1 + h_2 + h_3 = 0 \tag{3.36}$$

gelten muß. Deshalb ähnelt das Phasendiagramm einer Triangle. Die Methode das Potential durch eine Taylorentwicklung darstellen zu können, kann scheitern, wenn der 'kubische' Term durch eine versteckte oder unerwartete Symmetrie am Übergangspunkt verschwindet. Außerdem ist es bewiesen, daß der andere berechnete Übergangspunkt zweiter Art für $v' = 0$ für die meisten realen symmetrischen Modelle nicht existiert. In der Tat scheitert die Landau-Theorie für das 3-Zustands-Potts-Modell auf dem quadratischen Gitter, da sie für $v' > 0$ einen Phasenübergang erster Art vorhersagt.

3.6 Die Berechnung der Transfermatrix des zweidimensionalen 3-Zustands-Potts-Modells

Die Berechnung des kritischen Punktes des Potts-Modells kann mit Hilfe von unterschiedlichen Methoden erfolgen. Eine Methode, mit der in Kapitel 3.2 der kritische Punkt des zweidimensionalen Ising-Modells berechnet wurde, ist die Hoch- und Tieftemperaturentwicklung. Analog läßt sich auch für das zweidimensionale Potts-Modell eine Dualitätsrelation zwischen Hoch- und Tieftemperaturphase herleiten. Da aber im Potts-Modell der Spin anstatt zwei q verschiedene Werte annehmen kann, ist die Berechnung der entsprechenden Zustandssumme viel komplizierter. Eine andere Methode, mit der man den kritischen Punkt einfacher bestimmen kann, ist der Transfermatrixformalismus.
Der Transfermatrixformalismus erlaubt es, das Problem der Summation über alle Konfigurationen, wie es in der Zustandssumme auftritt, auf ein algebraisches Problem zu übertragen, nämlich die Berechnung der Eigenwerte einer Matrix. Zur Bestimmung der freien Energie im thermodynamischen Limes wird sogar nur der höchste Wert dieser Matrix benötigt. Außerdem zeigt der Transfermatrixformalismus eine Zusammenhang zwischen Quantensystemen in $(d-1)$-Dimensionen und Gittermodellen in d Dimensionen.
In diesem Kapitel soll mit Hilfe dieser Methode der kritischen Punkt des Z_3-Potts-Modells auf einem zweidimensionalen quadratischem Gitter berechnet werden: Man betrachtet ein Gitter des Typs $L \times M$, das in eine euklidische Zeit-Richtung (vertikale Achse) und in eine „räumliche" Richtung (horizontale Achse) aufgeteilt ist (siehe Abbildung 19). Sei i eine Durchnumerierung der Punkte der horizontalen Gitterplätze und j die der vertikalen Gitterreihen, so kennzeichnet (i, j) einen Punkt im Gitter. Sei C_i der komplexe Vektorraum über den lokalen Freiheitsgeraden am Punkte i, d. h. für jedes i ist

$$C_i \cong \{\psi | \psi : \{s\} \to \mathbb{C}\} . \tag{3.37}$$

In unserem Fall handelt es sich lokal um die Spin-Zustände des Z_3-Potts-Modells ($s_i = 0, 1, 2$), dann ist C_i der dreidimensionale komplexe Vektorraum $\mathbb{C}^3$. Eine

Abbildung 19: $L \times M$ Gitter mit vertikaler und horizontaler Kopplungsenergie K_v bzw. K_h

ausgezeichnete Basis in $\mathbb{C}^3$ ist durch die Elemente von $S = \{s\} = \{0,\, 1,\, 2\}$ gegeben:

$$|s\rangle \cong \psi_s : S \to \mathbb{C} \quad \text{mit}\, \psi_s = \delta(s_i, s_j) = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \tag{3.38}$$

Die Zustandsumme ist

$$\mathcal{Z} = \sum_{\text{über alle Konfigurationen}} e^{-\beta\mathcal{H}}$$

Entsprechend der Aufspaltung des Gitters in eine räumliche und in eine Zeit-Richtung spalten wir auch die Energie auf; dabei wird vorausgesetzt, daß es nur Wechselwirkungsterme zwischen nächsten Nachbarn gibt:

$$\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j\rangle} K_h \cos\left(\frac{2\pi}{3}(s_{ij} - s_{i+1,j})\right) + \sum_{\langle i,j\rangle} K_v \cos\left(\frac{2\pi}{3}(s_{ij} - s_{i,j+1})\right) , \tag{3.39}$$

wobei K_h und K_v die Kopplungskonstanten in horizontaler bzw. in vertikaler Richtung sind, die nicht unbedingt gleich sein müssen. Oder da

$$\cos\left(\frac{2\pi}{3}\Delta s\right) = \begin{cases} 1 \\ -1/2 \\ -1/2 \end{cases}$$

nur zwei Werte annimmt, kann ich die Energie auch schreiben als

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j\rangle} \left(\hat{K}_h \delta(s_{ij}, s_{i+1,j}) + \hat{K}_v \delta(s_{ij}, s_{i,j+1})\right) \tag{3.40}$$

Dabei ist $\hat{K}_{h,v} = \frac{2}{3}\, K_{h,v}$ und die Hamiltonfunktion wird um den Nullpunkt verschoben, was aber die Berechnung der freien Energie ($F \sim \log \mathcal{Z}$) nicht beeinträchtigt. Für die weitere Berechnung benutzen wir die clock-Modell-Schreibweise (3.39) und definieren die folgenden Boltzmann-Gewichte:

$$W_{ij} = e^{K_h \cos(\frac{2\pi}{3}(s_{ij} - s_{i+1,j}))}\, ; \quad V_{ij} = e^{K_v \cos(\frac{2\pi}{3}(s_{ij} - s_{i,j+1}))}$$

Wir wählen toroidale Randbedingungen, d. h. $s_{L+1,j} = s_{1,j}$ und $s_{i,M+1} = s_{i,1}$. Dann können wir die Transfermatrix T definieren als

$$T(\{\sigma_{j+1}\}, \{\sigma_j\}) = \prod_{i=1}^{L} V_{ij}\, W_{ij}. \tag{3.41}$$

$\{\sigma_j\}$ stellt die Menge der Gitterplätze in der j-ten Gitterreihe in vertikaler Richtung dar. Dann können wir für die Zustandssumme schreiben:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma_1\}} T(\{\sigma_1\}, \{\sigma_M\}) \sum_{\{\sigma_M\}} T(\{\sigma_M\}, \{\sigma_{M-1}\}) \sum \ldots \sum_{\{\sigma_2\}} T(\{\sigma_2\}, \{\sigma_1\})\, . \tag{3.42}$$

Für die Zustandssumme auf einem toroidalen Raum-Zeit-Gitter, welches in Zeit-Richtung die Länge M hat, gilt offensichtlich:

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Spur} T^M = \sum_n \Lambda_n^M\, , \tag{3.43}$$

wobei Λ_n die Eigenwerte von T sind. Die Definition der Spur bzw. der Matrixmultiplikation für T führt also zur Summation über alle Konfigurationen. Da die Boltzmann-Gewichte nicht von j abhängen, lassen wir bei W und V den zweiten Index weg. Wir wollen die Transfermatrix, in Analogie zur Quantenmechanik, im Raum H aller komplexwertigen Funktionen über den Konfigurationen auf dem räumlichen Gitter (hier ist es nur ein Spinreihe in horizontaler Richtung) schreiben:

$$H = \underbrace{\mathbb{C}^3 \otimes \ldots \otimes \mathbb{C}^3}_{L\text{-mal}} \tag{3.44}$$

Die Transfermatrix ist demnach eine $3^L \times 3^L$-Matrix. Um T als Matrix darstellen zu können, müssen wir zunächst die Matrixform der Boltzmann-Gewichte finden.

1. Horizontale Boltzmann-Gewichte

Es ist

$$W_i = e^{K_h} \cos\left(\frac{2\pi}{3}(s_i - s_{i+1})\right) = \begin{cases} e^{K_h} & \text{für } s_i = s_{i+1} \\ e^{-K_h/2} & \text{für } s_i \neq s_{i+1} \end{cases} \tag{3.45}$$

Wir müßen also eine Matrix finden, die auf den Zustand $|s_i s_{i+1}\rangle$ wirkt, um so die Boltzmann-Gewichte in (3.45) zu erhalten. Da hier kein Übergang in eine andere Gitterreihe $\{\sigma_{j+1}\}$ in vertikaler Richtung erfolgt, muß die Matrix W diagonal sein. Wir definieren deshalb eine Matrix Z_i als

$$Z_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \omega & 0 \\ 0 & 0 & \omega^2 \end{pmatrix}_i \text{ mit } \omega = e^{2\pi\, i/3} \,. \tag{3.46}$$

Es gilt offenbar $\omega^2 = \omega^* = \omega^{-1}$ und $1 + \omega + \omega^2 = 0$. Dann ist

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(Z_i Z_{i+1}^+ + Z_i^+ Z_{i+1})|s_i s_{i+1}\rangle &= \frac{1}{2}(\omega^{s_i}\omega^{-s_{i+1}} + \omega^{-s_i}\omega^{s_{i+1}})|s_i s_{i+1}\rangle \\ &= \cos\left(\frac{2\pi}{3}(s_i - s_{i+1})\right)|s_i s_{i+1}\rangle \end{aligned} \tag{3.47}$$

Somit läßt sich W_i durch die Matrix Z_i ausdrücken:

$$W_i = e^{\frac{1}{2}K_h(Z_i Z_{i+1}^+ + Z_i^+ Z_{i+1})} \tag{3.48}$$

2. Vertikale Boltzmann-Gewichte

Das Boltzmanngewicht für den i-ten Spin in der j-ten Reihe lautet:

$$V_i = e^{K_v \cos(\frac{2\pi}{3}(s_i - \sigma_i))} \,. \tag{3.49}$$

Dabei kann der Cosinus-Term in Gleichung (3.49) folgende Werte annehmen:

		$s_i =$		
$\cos(\frac{2\pi}{3}(s_i - \sigma_i))$		0	1	2
$\sigma_i =$	0	1	-1/2	-1/2
	1	-1/2	1	-1/2
	2	-1/2	-1/2	1

Somit können wir V als Matrix V_i schreiben, die auf den Zustand $|s_i\rangle$ wirkt:

$$\begin{aligned} V_i &= e^{K_v} \cdot \mathbb{1} + \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{K_v}}{2}}\,(\mathrm{X_i} + \mathrm{X_i^+}) \\ \text{oder } V_i &= e^{K_v}\left(\mathbb{1} + \mathrm{e}^{-\frac{3\mathrm{K_v}}{2}}\,(\mathrm{X_i} + \mathrm{X_i^+})\right) \end{aligned} \tag{3.50}$$

mit den Aufsteigeoperator

$$X_i = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}_i \,. \tag{3.51}$$

Setzt man V_i und W_i in Gleichung (3.41) ein, so erhält man für die Transfermatrix:

$$T = \prod_{i=1}^{L} e^{\frac{1}{2}K_h(Z_i Z_{i+1}^{+} + Z_i^{+} Z_{i+1})}\, e^{K_v} \left(\mathbb{1} + \mathrm{e}^{-\frac{3\mathrm{K_v}}{2}} (\mathrm{X_i} + \mathrm{X_i^{+}})\right) \tag{3.52}$$

Man beachte, daß X_i und Z_i am gleichen Gitterplatz nicht miteinander kommutieren:

$$\left.\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \omega & \\ & & \omega^2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & \omega & 0 \\ 0 & 0 & \omega^2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \omega & \\ & & \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \omega \\ \omega^2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}\right\} X_i Z_i = Z_i X_i \omega\,.$$

Die Operatoren kommutieren für verschiedene Gitterplätze, d. h. es gilt:

$$X_i Z_j = Z_j X_i\, \omega^{\delta^{ij}} \tag{3.53}$$

X und Z stellen eine Z_3-Verallgemeinerung der Paulimatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

dar (siehe [35], [36]) Wir suchen nun einen geeigneten Grenzwert, in der die euklidische Zeitachse als kontinuierlich betrachtet werden kann, d. h. wir berechnen diesselbe Zustandssume, indem wir das gesamte Zeitintervall in eine unendliche Anzahl von Schritten unterteilen. Denn in diesem sogenannten Zeit-Kontinuum-Limit ist das Potts-System äquivalent zu einem eindimensionalen quantenmechanischen System, dessen Hamiltonoperator $\hat{H}$, eine Quantenspinkette beschreibt.
Wir müssen also bestimmen, wie K_v und K_h geändert werden müssen, damit die Transfermatrix die Form

$$T = T_0\, e^{-\tau \hat{H}} \approx T_0(1 - \tau \hat{H} + \dots) \quad \text{mit}\ \tau \to 0 \tag{3.54}$$

annimmt. τ ist die infinitesmale euklidische Zeitdifferenz (Abstand zwischen den horizontalen Gitterlinien). Betrachtet man T an dem asymmetrischen Grenzwert $K_h \to 0$ und $K_v \to \infty$, so kann man T in der obigen Form (3.54) schreiben:

$$\begin{aligned} T =& \left(\mathbb{1} + \frac{1}{2}\mathrm{K_h} \sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{L}} ((\mathrm{Z_i Z_{i+1}^{+}} + \mathrm{Z_i^{+} Z_{i+1}}) + \dots)\right) \mathrm{e}^{\mathrm{LK_v}} \left(\mathbb{1} + \mathrm{e}^{-\frac{3\mathrm{K_v}}{2}} \sum_{\mathrm{i}} (\mathrm{X_i} + \mathrm{X_i^{+}}) + \dots\right) \\ =& e^{LK_v} \left(\mathbb{1} + \mathrm{e}^{-\frac{3\mathrm{K_v}}{2}} \underbrace{\left[\sum_{i=1}^{L} (X_i + X_i^{+}) + \lambda \sum (Z_i Z_{i+1}^{+} + Z_i^{+} Z_{i+1})\right]}_{-\hat{\mathrm{H}}} + \dots\right), \end{aligned} \tag{3.55}$$

wobei der Term $\lambda = \frac{1}{2} K_h e^{\frac{3K_v}{2}}$ festgehalten werden muß, damit das Produkt $K_h \cdot e^{3K_v/2}$ erhalten bleibt. τ, T_0 und $\hat{H}$ lassen sich aus Gleichung (3.55) ablesen:

$$\tau = e^{-\frac{3K_v}{2}} \quad \text{und} \quad T_0 = e^{LK_v}$$

$$\text{und} - \hat{H} = \sum_{i=1}^{L} (X_i + X_i^+) + \lambda \sum (Z_i Z_{i+1}^+ + Z_i^+ Z_{i+1})$$

Im Raum $K_h K_v$ existiert eine Menge von Kurven, die durch den Parameter λ charakterisiert sind und dessen Korrelationslänge konstant ist. Die kritische Kurve ist die Kurve, wo die Korrelationslänge unendlich wird. Das langreichweitige Verhalten des Systems bleibt entlang einer Kurve mit festen Wert für λ unverändert. Die Punkte auf der symmetrischen Linie bei $\lambda = 1$ entsprechen unterschiedlichen Temperaturendes klassischen Potts-Modells (siehe Abbildung 20). Somit können wir jede

Abbildung 20: Die Kurven $K_h K_v$ in Abhängigkeit vom Parameter λ

Temperatur eines isotropen Modells zu einem quantenmechanischen Modell mit entsprechenden λ in Beziehung setzen.
Ein großes λ (kleines λ) entspricht einer großen Kopplugsenergie $K_{h,v}$ (kleinen $K_{h,v}$).
Der Parameter λ unterscheidet zwischen den verschiedenen Phasen: Wenn $\lambda > 1$ ist, dann befindet sich das System in der Tieftemperaturphase und, wenn $\lambda < 1$ ist, entsprechend in der Hochtemperaturphase. $\lambda = 1$ beschreibt die kritische Kurve.
Der Transfermatrix ist also nichts anderes als eine algebraische Darstellung der Hoch- und Tieftemperaturphase. Die Matrizen, die die Transfermatrix beschreiben, sind die sogenannten Spin-Flip-Operatoren:
Wir können auch eine Basis so wählen, daß anstatt Z_i die Matrix X_i diagonal ist. Dann ist X_i der Rotationsoperator und Z_i und Z_i^t der Absteige- bzw. der Aufsteigeoperator, die jeweils den Spin erniedrigen bzw. erhöhen. Dadurch, daß $\tau \to 0$, bleiben nur Matrixelemente von $\hat{H}$ übrig, die immer nur zwei benachbarte Spins umdrehen,

was die Berechnung der Transfermatrix erheblich vereinfacht. Man nennt deshalb die Matrix $\hat{H}$ auch *sparce matrix*, was so viel heißt wie *dünn besetzte Matrix.* Zum Beispiel, wenn $i = 3$ ist, dann bewirkt der Term $\lambda Z_3 Z_4^+$ eine Erniederigung des dritten Spins und eine Erhöhung des vierten Spins, also

$$\hat{H}\,|\,s_1\;s_2\;s_3\;s_4\;\ldots\rangle = |\,s_1\;s_2\;s_3{+}1\;s_4{-}1\;\ldots\rangle$$

Die Transfermatrix könnte beliebig viele Spins der Kette j beim Übergang zur Kette $j+1$ ändern, allerdings weil $\mathcal{H}$ Z_3 invariant ist [6], bleibt der Gesamtspin $\sum_{\langle i,j\rangle} s_{ij} \mod 3$ invariant.

Wie schon oben erwähnt, ergibt sich die Freie Energie aus dem maximalen Eigenwert der Transfermatrix: Sei T diagonalisiert, dann (Baxter Gl.(7.2.4)) gilt:

$$\text{Spur}\; T^M = \sum_i \Lambda^M \xrightarrow[M\to\infty]{} \Lambda^M_{\max} + \text{ Korrekturterme }, \tag{3.56}$$

also $\beta F = -\log \mathcal{Z} = -M \log \Lambda_{\max} +$ Korrekturterme, die für $M \to \infty$ verschwinden.

Die Korrelationslänge wird durch das Verhältnis der beiden größten Eigenwerte bestimmt (Baxter [25], S.117 Gl.(7.10.41)):

$$\xi^{-1} \sim \log \frac{\Lambda_1}{\Lambda_2}. \tag{3.57}$$

Wenn die beiden größten Eigenwerte entartet sind, dann divergiert die Korrelationslänge. Da $T \sim 1 - \tau\hat{H} + \ldots$ bedeutet dies, daß wir das Spektrum von $\hat{H}$ untersuchen müssen. In Analogie zur Quantenmechanik ist der „Gap“ (=Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand) äquivalent zur reziproken Korrelationslänge ξ^{-1} (= Abstand des zweiten Eigenwertes vom niedrigsten Eigenwert). In den meisten Fällen ist es viel einfacher, den Gap von $\hat{H}$ zu berechnen als die größten Eigenwerte von T zu finden.

3.7 Algebraische Formulierung und Dualität des zweidimensionalen Potts-Modells

Für die Herleitung der Dualitätsbeziehung benutzen wir der Einfachheit halber diesmal die andere Hamiltondarstellung (3.40). Die horizontalen und vertikalen Boltzmann-Gewichte müssen dementsprechend umgeschrieben werden:

[6] Z_3-Rotation aller Spins: $s_{ij} \to s_{ij} + 1 \mod 3$ läßt die Boltzmann-Gewichte invariant, da diese nur von der Differenz der s_{ij} abhängen.

1. Horizontales Boltzmann-Gewicht

$$
\begin{aligned}
\hat{W}_i =& e^{\hat{K}_h\,\delta(s_i,\,s_{i+1})} = \frac{2}{3}\left[\left(\zeta+\frac{1}{2}\right)\, e^{\hat{K}_h}\ + 1-\zeta\right] \\
=& \left(e^{\hat{K}_h}-1\right) \underbrace{\frac{2}{3}\left(\zeta+\frac{1}{2}\right)}_{=:\,\frac{e_{2i-1}}{\sqrt{Q}}} +1\,,
\end{aligned}
\tag{3.58}
$$

wobei $\zeta = \frac{1}{2}(Z_i Z_{i+1}^{+} + Z_i^{+} Z_{i+1})$ ist.

2. Vertikales Boltzmann-Gewicht

$$
\begin{aligned}
\hat{V}_i = e^{\hat{K}_v\,\delta(s_i,\,\sigma_i)} &= e^{\hat{K}_v}\cdot \mathbb{1} + \mathrm{X_i} + \mathrm{X_i^+} \\
&= e^{\hat{K}_v} - \mathbb{1} + \underbrace{X_i + X_i^{+} + \mathbb{1}}_{=:\sqrt{\mathrm{Q}}\mathrm{e_{2j}}}
\end{aligned}
\tag{3.59}
$$

Die Operatoren e_i, mit $i \le i \le 2L-1$, sind die sogenannten Temperley-Lieb-Operatoren, die die folgende Temperley-Lieb-Algebra erfüllen (siehe Baxter [25], S.334-335 und Temperley-Lieb [37]):

$$
\boxed{
\begin{array}{rcl}
e_j^2 &=& \sqrt{Q}\, e_i \\
e_i\, e_j &=& e_j\, e_i \text{ für } |i-j| \geq 2 \\
e_i\, e_{i\pm 1}\, e_i &=& e_i \\
\text{Spur } e_{i_1}\, e_{i_2}\, \ldots\, e_{i_n} &=& Q^{-\frac{n}{2}} \text{ Spur } \mathbb{1}\,, \text{wenn } \mathrm{i_1} > \mathrm{i_2} > \ldots > \mathrm{i_n}
\end{array}
}
$$

Q spielt hier die Rolle des Parameters q des q-Zustands-Potts-Modells. Allgemein lassen sich die Boltzmann-Gewichte eines Q-Zustands-Potts-Modells für beliebige Q durch die Operatoren e_i, die die Temperley-Lieb-Algebra erfüllen, ausdrücken. In dem hier betrachteten Z_3-Potts-Modell ist $Q = 3$ und die Operatoren e_i werden durch die 3×3 Matrizen X und Z realisiert:

$$
e_i = \begin{cases} Z_i Z_{i+1}^{+} + Z_i^{+} Z_{i+1} & \text{falls } i \text{ ungerade} \\ X_i + X_i^{+} + \text{ konst.} & \text{falls } i \text{ gerade} \end{cases}
\tag{3.60}
$$

Allgemein kann man für die Boltzmanngewichte für beliebige Q schreiben:

$$
\hat{W}_i = \sqrt{Q}\left(e^{\hat{K}_h}-1\right) e_{2i-1} + 1 \quad \text{und} \quad \hat{V}_i = e^{\hat{K_v}} - 1 + \sqrt{Q}\, e_{2i}
$$

bzw.

$$\hat{W} = \prod_{i=1}^{L} (1 + \xi_h \, e_{2i-1}) \quad \text{und} \quad \hat{V} = \prod_{i=1}^{L-1} \sqrt{Q} \, (\xi_v + e_{2i}) \,, \tag{3.61}$$

mit $\xi_{h,v} = (\sqrt{Q})^{-1}(e^{K_{h,v}} - 1)$.

Nach Baxter ([25], S.76ff) spielt es bei einem großen Gitter keine Rolle, ob die Gitterplätze i gerade oder ungerade sind. Damit ist $\mathcal{Z} = \text{Spur}\ (\hat{V}\hat{W})^M$ invariant gegenüber der Transformation $e_i \rightarrow e_{i+1}$ [7]. Nun ist

$$\begin{aligned} \hat{V}\hat{W} &= \prod_{i=1}^{L} (\xi_v \, \xi_h) \, (\xi_h^{-1} + e_{2i-1}) \, \sqrt{Q} \, (1 + \xi_v^{-1} \, e_{2i}) \\ &= (\xi_v \, \xi_h) \prod_{i=1}^{L} \hat{V}(\xi_h^{-1}) \, \hat{W}(\xi_v^{-1}) \,, \qquad \text{vergleiche Baxter [25], Gl.(12.4.20)ff} \end{aligned} \tag{3.62}$$

oder

$$\log \mathcal{Z}(\xi_v, \, \xi_h) = L \, \log(\xi_v \, \xi_h) + \log \mathcal{Z}(\xi_v^{-1}, \, \xi_h^{-1}) \,. \tag{3.63}$$

Wenn $\xi_v, \xi_h \ll 1$, dann befindet sich das System in der Hochtemperaturphase. Es existiert aber ein Punkt $\hat{\xi}_{h,v}$, in dem das Boltzmanngewicht gleich dem in der Tieftemperaturphase ist: $\xi_{h,v}^{-1} = \hat{\xi}_{h,v}$. Nimmt man jetzt an, daß es *nur eine* nichtanalytische Kurve im Raum der Boltzmanngewichte $\xi_v \, \xi_h$ gibt, dann muß dies die Kurve $\xi_h = \xi_v^{-1}$ sein, denn sonst gäbe es mit einer Kurve $\xi_v \, \xi_h < 1$ auch eine gleiche Kurve bei $\xi_v^{-1} \, \xi_h^{-1}$. Nun hatten A. Hintermann, H. Kunz und F. Y. Wu 1978 gezeigt, daß es nur einen Phasenübergang gibt [38]. Damit ist die kritische Kurve des Q-Zustands-Potts-Modells gegeben durch

$$(e^{\hat{K}_h} - 1)(e^{\hat{K}_v} - 1) = Q \,. \tag{3.64}$$

Das Potts-Modell ist im kritischen Punkt selbstdual, d. h. $\hat{K}_v = \hat{K}_h = K_c$. Die Lösung der Dualtitätsrelation (3.64) ergibt den Wert für die kritische Temperatur:

$$K_c = \ln(1 + \sqrt{Q}) \tag{3.65}$$

Das Dualitätsargument kann auch auf einem Bienenwabengitter angewendet werden (vergleiche Baxter [25], Fig. 6.4, Fig. 12.10). Da es aber im Bienenwabengitter anstatt zwei drei Kopplungsenergien gibt, erhält man andere kritische Werte (siehe Baxter [25], S.348).

[7] Wenn toroidale Randbedingungen gegeben sind.

3.8 Die Renormierungstheorie

In diesem Kapitel sollen die wichtigsten Grundideen der Renormierungstheorie erläutert werden. Eine der grundlegenden Ideen der Theorie ist, eine endliche Anzahl von Freiheitsgeraden eines Gittersystems durch Mittelung zu eleminieren (Block-Spin-Transformation) [11]. Im Laufe der Zeit wurden unterschiedliche Methoden entwickelt, die aber letztendlich alle mit mathematischen Gleichungen enden, die die sogenannten RG-Flüsse in einem Parameterraum beschreiben. Aus Kapitel 2 wissen wir bereits, daß durch die Änderung der Längenskala eines Gittersystems die Eigenschaften des Systems am kritischen Punkt erhalten bleiben. Somit kann das kritische Verhalten durch die Fixpunkte der renormalization group (RG) - Transformation beschrieben werden. Das Ziel der RG-Theorie ist es, das Verhalten der renormalization group in der Nähe der Fixpunkte zu untersuchen. Zum Beispiel konnte man aus der RG-Theorie auf die Skalenform der thermodynamischen Funktionen schließen. Ein weiteres wichtiges Ergebnis ist die Einteilung der verschiedenen Systeme in die unterschiedlichen Universalitätsklassen.

3.8.1 Definition der RG-Transformation

Zunächst soll die RG-Transformation definiert werden [21]: Das System wird am Anfang durch die reduzierte Hamiltonfunktion, $\overline{\mathcal{H}} = \mathcal{H}/kT$, beschrieben, die dann durch die 'Renormalisierung' des System durch eine neue reduzierte Hamiltonfunktion, $\overline{\mathcal{H}}$, bestimmt ist:

$$\overline{\mathcal{H}}' = \mathcal{R}\overline{\mathcal{H}}\,. \tag{3.66}$$

Der RG-Operator $\mathcal{R}$ erniedrigt die Anzahl der Gitterplätze von N auf N'. Dies kann entweder im reellen Raum durch die Entfernung oder Gruppierung von Spins geschehen. Der Skalenfaktor der Transformation, b, ist definiert durch

$$b^d = \frac{N}{N'}, \tag{3.67}$$

wobei d die Raumdimension ist. Ein Beispiel einer RG-Transformation zeigt Abbildung 21. Die Hamiltonfunktion hängt nur noch von der Hälfte der ursprünglichen Spins ab. Das neue Gitter behält zwar seine eigentliche Topologie, aber mit einer Änderung der Längenskala von $b = \sqrt{2}$.
Eine notwendige Bedingung bei der Ausführung der RG-Transformation ist, das die zugehörige Zustandssumme sich nicht ändern darf:

$$\mathcal{Z}_{N'}(\overline{\mathcal{H}}') = \mathcal{Z}_N(\overline{\mathcal{H}}). \tag{3.68}$$

Deswegen bleibt auch die freie Energie dieselbe. Da es sich bei der freien Energie um eine extensive Größe handelt, transformiert sich die reduzierte freie Energie pro

Abbildung 21: Renormalisierung eines quadratischen Gitters mit einem Skalenfaktor $b = \sqrt{2}$. Die volle und die gestrichelte Linie zeigt das Orginal- bzw. das renormalisierte Gitter [21].

Spin, $\overline{f} = f/kT$, wie

$$\overline{f}(\overline{\mathcal{H}}') = b^d\,\overline{f}(\overline{\mathcal{H}})\,. \tag{3.69}$$

Ebenso werden andere thermodynamische Größen, die das System charakterisieren, wie zum Beispiel die Korrelationsfunktion, durch den Skalenfaktor b entsprechend transformiert. Aus der Transformations-Gleichung der thermodynamischen Größen erhält man schließlich ihre Skalenform.
Man sucht jetzt die Fixpunkte der RG-Transformation,

$$\overline{\mathcal{H}}' = \overline{\mathcal{H}} = \overline{\mathcal{H}}^*\,,$$

in denen das System invariant unter der Skalentransformation ist. Die Skaleninvarianz ist eins der Merkmale der kritischen Phänomene: Betrachtet man das Verhalten der Korrelationslänge, die in Einheiten der Gitterzwischenräume gemessen wird, dann müßte sie sich auf sich selbst abbilden:

$$\xi' = \xi = \xi^*. \tag{3.70}$$

Aber durch die Skalentransformation wird die Korrelationslänge durch den Skalenfaktor b ebenfalls reduziert auf

$$\xi' = b^{-1}\xi. \tag{3.71}$$

Die Gleichungen (3.70) und (3.71) stimmen aber nur dann überein, wenn die Korrelationslänge unendlich wird, wie man es am kritischen Punkt erwartet.

3.8.2 Der RG-Fluß im Parameterraum

In diesem Abschnitt soll das Verhalten der Hamiltonfunktion in der Nähe der Fixpunkte untersucht werden. Hierfür ist es nützlich das Konzept des Parameterraumes einzuführen. Wiederholt man immer wieder die RG-Transformation der Hamiltonfunktion, so kann den Verlauf von der eigentlichen bis zur endgültigen Hamiltonfunktion als Fluß im Parameterraum dargestellt werden. Eine allgemeine reduzierte Hamiltonfunktion kann geschrieben werden als:

$$\overline{\mathcal{H}} = \sum_{\alpha} \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\zeta}\,, \tag{3.72}$$

wobei die Komponenten von $\boldsymbol{\zeta}$ Produkte von Operatoren mit geeigneter Symmetrie sind und die entsprechenden Komponenten von $\boldsymbol{\mu}$ die konjugierten Felder sind. Zum Beispiel könnte eine Komponente von $\boldsymbol{\zeta}$ ein einzelner Spinterm, gekoppelt mit einem Magnetfeld, oder eine Wechselwirkungsterm benachbarter Spins sein. Die Felder $\boldsymbol{\mu}$ könnte man als einen Vektor betrachten, der die Position des Systems in einem unendlich-dimensionalen Parameterraum markiert. Unter mehrfacher Anwendung der RG-Transformation ändert sich die die Hamiltonfunktion und das System bewegt sich durch den Parameterraum.

$$\boldsymbol{\mu}' = \mathcal{R}\boldsymbol{\mu}. \tag{3.73}$$

Am Fixpunkt gilt

$$\boldsymbol{\mu}' = \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}^*\,.$$

Die kleinen Abweichungen des Fixpunktes im ursprünglichen und renormalisierten System können miteinander in Beziehung gesetzt werden, indem man die RG-Transformation (3.73) in einer Taylor-Reihe um den Fixpunkt entwickelt:

$$\delta\boldsymbol{\mu}' = A(\boldsymbol{\mu}^*)\,\delta\boldsymbol{\mu}\,, \tag{3.74}$$

$$\text{mit} \qquad \delta\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}^* \quad \text{und} \quad \delta\boldsymbol{\mu}' = \boldsymbol{\mu}' - \boldsymbol{\mu}^*\,.$$

Die Eigenwerte λ_i und Eigenvektoren $\boldsymbol{v}_i$ der Matrix A bestimmen die kritischen Eigenschaften der Hamiltonfunktion. Die Eigenwerte sind homogene Funktionen von b. Deshalb gilt:

$$\lambda_i(b) = b^{y_i}\,, \tag{3.75}$$

wobei y_i unabhängig vom Skalenfaktor b ist. Diese Gleichung ist uns schon aus Kapitel 2.8 (S. 22, Gl.(2.60)) bekannt. Aus ihr lassen sich nämlich die kritischen Exponenten berechnen. Für eine Hamiltonfunktion nahe des Fixpunktes $\boldsymbol{\mu}^*$, kann die

Abweichung vom Fixpunkt durch die Summation der Eigenvektoren $\boldsymbol{v}_i$ ausgedrückt werden:

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}^* + \sum_i g_i \boldsymbol{v}_i \,. \tag{3.76}$$

Die Koeffizienten g_i nennt man die linearen Skalenfelder. Sie beschreiben die ursprüngliche Position der Hamiltonfunktion. Unter der RG-Transformation wird die Entwicklung (3.76) zu

$$\boldsymbol{\mu}' = \boldsymbol{\mu}^* + \sum_i b^{y_i}\ \boldsymbol{v}_i \,, \tag{3.77}$$

$$\text{d. h.} \quad {g_i}' = b^{y_i} g_i \,.$$

Der Fluß der Hamiltonfunktion im Parameterraum hängt also nur von einer bestimmten Menge skalierter Felder g_i und von der Form von y_i ab.
Für positive y_i erhöht sich das skalierte Feld g_i unter den wiederholten Iterationen der RG-Transformation und lenkt das System vom Fixpunkt weg. Diese Felder werden als relevante Variablen bezeichnet. Wenn y_i negativ ist, dann sinkt der Wert für g_i unter den RG-Transformationen und lenkt das System näher an den Fixpunkt. Diese Felder sind die irrelevanten Variablen. Wenn y_i Null wird, dann nennt man die zugehörigen skalierten Felder marginale Variablen. Somit hängt die Stabilität eines Fixpunktes von der Zahl der relevanten und irrelevanten Eigenwerte ab. Graphisch erhält man ein Phasendiagramm, in dem die Flüsse der renormalisierten Hamiltonfunktion im Parameterraum in Abhängigkeit von den relevanten und irrelevanten Feldern abgebildet sind. Das Phasendiagramm in Abbildung 22 zeigt einen Fixpunkt mit einem relevanten und zwei irrelevanten skalierten Feldern. Die gepunkteten Kurven erreichen den Fixpunkt nicht, sondern ändern kurz vor dem Fixpunkt ihre Richtung parallel zur positiven g_1-Achse. g_1 ist in diesem Fall die relevante Variable. Physikalisch entspricht dies einem System, das vom kritischen Punkt weggelenkt wird, wie es bei Systemen mit zunehmenden Fluktuationen beobachtet wird.
Die Punkte, die in den Fixpunkt fließen, definieren eine Oberfläche, die sogenannte kritische Oberfläche, auf der das relevante skalierte Feld Null ist. Sie repräsentiert alle Punkte mit unendlicher Korrelationslänge. Die kritische Oberfläche wird nur durch wenige relevante Parameter charakterisiert. Zum Beispiel wird für die meisten Magneten mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen der kritische Punkt erreicht, wenn das magnetische Feld und die Temperatur richtig eingestellt sind.

3.8.3 Eine RG-Beschreibung des zweidimensionalen Potts-Modells

Eine Lösung für das zweidimensionale Potts-Modell im RG-Formalismus zu finden, erwies sich als äußerst schwierig. Trotz zahlreicher Versuche verschiedener RG-Methoden lieferte das Potts-Modell nicht das Resultat, was Baxter über die Art

Abbildung 22: Die durchgezogenen Linien zeigen die Flüsse auf der kritischen Oberfläche, die sich schließlich im Fixpunkt schneiden. Die gepunkteten Linien liegen nahe der kritischen Oberfläche und werden durch das Ansteigen des relevanten Feldes g_1 vom Fixpunkt weggelenkt. [21]

des Phasenübergangs herausgefunden hatte. Baxter zeigte, daß der Übergang des zweidimensionalen Potts-Modells für $q \leqslant 4$ kontinuierlich und für $q > 4$ erster Art ist. Eine RG-Berechnung des Potts-Modells zeigte aber für alle q nur kontinuierliche Übergänge. Dieses Ergebnis ist erstaunlich, weil die gleichen Berechnungen für $q \leqslant 4$ die exakten Werte der kritischen Exponenten ergaben. In einer typischen RG-Transformation werden die Kluster der Spins durch effektive oder sogenannte 'cell'-Spins ersetzt. Diese Prozedur bringt unkontrollierte Beschneidungen mit sich. Es muß möglich sein, die Phase des Systems durch die Zustände einer oder mehrerer Spinvariablen beschreiben zu können, solange die Konfiguration des Systems unter der RG-Transformation unverändert bleibt.
Für das Ising-Modell in einem Magnetfeld findet der Übergang erster Art zwischen zwei geordneten Phasen statt. Hier reichen die zwei Zustände des Ising-Spins aus, um die Phasen zu charakterisieren.
Im Potts-Modell findet dagegen der Übergang erster Art zwischen geordneten und ungeordneten Phasen statt. In diesem Fall sind mehr als einige Zustände nötig, um die ungeordnete Phase zu charakterisieren. Niemanden ist dies bis jetzt gelungen.
Deswegen entschloß sich Nienhaus et al einen speziellen cell-Spinzustand einzuführen: die ungeordneten Spinkonfigurationen in einer Zelle stellen einen neuen

cell-Spinzustand dar, eine unbesetzte oder freie Zelle [27]. Technisch läßt sich dieser neue Spinzustand realisieren, indem man eine Gitter-Gas-Variabel t_i in die Hamiltonfunktion hinzufügt. Entweder ist die Zelle bzw. Gitterplatz besetzt ($t_i = 1$) oder frei ($t_i = 0$). Durch die RG-Transformation werden die ungeordneten Spin-Konfigurationen auf den freien Zustand abgebildet. Der Parameterraum des ursprünglichen Modells wird durch ein chemisches Potential, das die Konzentration der freien Stellen regelt, erweitert. Somit findet die RG-Transformation im erweiterten Parameterraum statt, der durch die Hamiltonfunktion eines sogenannten *Potts-Gitter-Gases* beschrieben wird:

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} t_i\, t_j (K + J\delta(s_i, s_j)) - \Delta \sum_i t_i \tag{3.78}$$

K und J sind die Kopplungkonstanten der Gitter-Gas- bzw. der Potts-Wechselwirkung. Wenn $\Delta = -\infty$, dann erhält man wieder das ursprüngliche Potts-Modell. Die RG-Methode von Kadanoff lieferte einen sehr guten Wert für die kritische Obergrenze q_c des Phasenübergangs: $q_c \simeq 4.08$ [27]. Abbildung 23 zeigt die

Abbildung 23: RG-Flußdiagramm des q-Zustands-Potts-Modells, schematisch [27]

Topologie des RG-Flußdiagramms im Raum der Temperatur, J^{-1}, der Fugazität, $e^{\Delta - 3J/kT}$, und der Anzahl der Zustände q. Die Oberfläche $ABCD$ trennt die ferromagnetische von den ungeordneten Phasen. Auf dieser Oberfläche befinden sich die Kurven von kritischen Fixpunkten, EF, und von trikritischen Fixpunkten, GE, die sich bei F für $q = q_c$ treffen. Die Fixpunktgerade CD enthält alle Übergangspunkte erster Art. Die Schnittgerade AB der kritischen Oberfläche mit der Ebene

$e^{\Delta-3J/kT} = 0$ entspricht dem allgemeinen q-Zustandsmodell, dessen kritische Temperatur bei $J_c^{-1}(q)$ liegt. Die RG-Flüsse liegen in den Ebenen mit konstantem q. Somit werden die Flüsse, die am Übergangspunkt des ‘normalen’ Potts-Modell beginnen, durch die kritische Fixkurve für $q \leqslant q_c$ bzw. durch die Fixkurve ‘1. Art’ für $q > q_c$ angezogen. Man beachte, daß eine Erhöhung des Wertes q oder eine zunehmende Verdünnung den gleichen Effekt haben; in beiden Fällen wird das System in einen Übergang erster Art gelenkt. Eine Besonderheit zeigt sich im Phasendiagramm des Potts-Gitter-Gases: es existiert eine Beziehung zwischen den kritischen und trikritischen Exponenten. In Übereinstimmung mit der Topologie des RG-Phasendiagramms, sollten die trikritischen Exponenten eine analytische Fortsetzung der kritischen Exponenten sein, was den Nijs vermutet hatte [27]. Nur Durch die Einführung eines neuen Spinzustandes konnte der Wechsel vom kontinuierlichen zu den Übergängen erster Art im RG-Formalismus erreicht werden.

4 Kommensurable-Inkommensurable Phasenübergänge

4.1 Kommensurable und inkommensurable Phasen

Es gibt Strukturen in der Natur, die bezüglich der Gitterkonstante nicht festgelegt sind, sondern sich stetig mit der Temperatur ändern. Solche Strukturen nennt man *quasi-periodisch* oder *inkommensurabel.* Sie rühren normalerweise von dem Gegenspiel zweier konkurierender Kräfte her. Die modulierte Struktur könnte ein anderes Gitter sein, wie eine periodische Gitterverzerrung, eine Verdrehung oder eine sinusförmige magnetische Struktur, oder eine Ladungsdichtewelle in einer, zwei oder drei Dimensionen.
Hierzu soll zunächst der Begriff *inkommensurable, kommensurable* und *chaotische* Phasen an einem einfachem Modell erklärt werden. Das Modell, ursprünglich von Frenkel und Kontorowa (1938) eingeführt, wurde von verschiedenen Autoren, insbesondere von Frank und Van der Merwe (1949) untersucht [39]. Das Modell findet heute noch Anwendung, wie ein Bericht aus jüngster Zeit zeigt (siehe Braun/Kivshar [40], 1998). Man betrachtet eine Kette von Atomen, die mit harmonischen Federn verbunden sind und die durch ein cosinusförmiges Potential mit Periode b beeinflußt wird (siehe Abbildung 24).

Abbildung 24: Das eindimensionale Frank und Van der Merwe Modell: Die Federn stellen die Wechselwirkungen zwischen den Atomen dar, die Cosinuskurve das Potential. (a) Kommensurable Struktur (b) Inkommensurable Struktur (c) chaotische Struktur [39]

Die Hamiltonfunktion des Modells lautet:

$$\mathcal{H} = \sum_n \frac{1}{2b^2} \left(x_{n+1} - x_n - a_0\right)^2 + V\left(1 - cos 2\pi b x_n\right), \tag{4.1}$$

wobei x_n die Position des n-ten Atoms ist. Bei Abwesenheit eines periodischen Potentials V, würde der harmonische Term eine Gitterkonstante a_0 bevorzugen, die allgemein inkommensurabel mit b ist: Das adsorbierte Gitter formt eine inkommensurable (I) Struktur (Abbildung 24(b)). Ein genügend großes Potential begünstigt

eher eine kommensurable (C) Struktur des Gitters, in der der mittlere Abstand zwischen den Atomen, a, ein rationaler Bruchteil der Periode b ist. In Abbildung 24(a) ist $2a = 3b$. Die Atome verlieren zwar elastische Energie, aber dafür hat ihre potentielle Energie zugenommen. Auch wenn das Potential nicht stark genug sein sollte, damit die Kette eine kommensurable Struktur annimmt, wird das Potential immer die Kette modulieren. Die Atome würden sich in die Richtung der Minima bewegen. Für genügend schwaches Potential wird die I - Phase bei naheliegenden höher geordneten C - Phasen immer instabil sein.
Außer den I - und C - Strukturen gibt es noch die chaotischen Strukturen. In diesem Fall ist das Potential sehr groß im Vergleich zum elastischen Term. Es existieren dann metastabile Zustände, wo die Atome über den potentiellen Minima zufällig verteilt sind (Abbildung 24(c)). Die chaotische Phase ist an dem Potential sozusagen „festgenagelt“.
Im Kontrast zu der I - Phase, ist es nicht möglich, das Gitter zu verschieben ohne eine Potentialbarriere zu überwinden. Hinsichtlich dieser Tatsache ist die chaotische Phase der C - Phase ähnlich, obwohl die mittlere Periode gewöhnlich inkommensurabel mit dem Potential ist. Wenn die Atome eine Ladung hätten, dann würde die I - Phase leiten und die chaotische Phase isolieren.
Beim obigen eindimensionalen Modell ist $T = 0$. Bei Temperaturen $T \neq 0$ spielt die Dimensionalität eine wichtige Rolle. Die Natur der Übergänge und die Struktur der I - Phasen ist in zwei und drei Dimensionen sehr verschieden:

- In zwei Dimensionen ist die inkommensurable Phase bei $T \neq 0$ eine ‘fließende’ Phase ohne langreichweitige Ordnung, d. h. sie dringt in die höher geordneten kommensurablen Phasen nicht ein. Viele zweidimensionale Systeme sind bekannt, in denen eine geordnete feste kommensurable Phase unter Variation der Temperatur oder dem chemischen Potential in eine ungeordnete flüssige Phase schmilzt. Diese Übergänge können entweder erster Art oder kontinuierlich sein.

- In drei Dimensionen scheint die I - Phase aus unendlichen vielen höher geordeneten abgeschlossenen C - Phasen zu bestehen, die man entweder durch eine unendliche Menge von echten inkommensurablen Phasen trennen kann oder nicht. Dieses Verhalten ist als *‘devil’s staircase’* bekannt. Dreidimesionale Systeme zeigen nur Übergänge erster Art.

Das physikalische System, in dem solche Phasenübergänge am meisten untersucht worden sind, ist Krypton adsorbiert auf Graphit, siehe Abbildung 25. Die Krypton-Atome ordnen sich in die sogenannte $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$-Struktur von Graphit ein. Die Graphit-Absorbtionsplätze formen eine dreieckige Anordnung. Der Durchmesser von Krypton-Atomen ist zu groß für eine Besetzung der nächsten Nachbarn. Die Krypton-Atome besetzen die honigwabenartigen Zellen von einen der drei äquivalenten Subgitter A, B, C. Für genügend hohen Druck und niedrige Temperatur wird

Abbildung 25: Eine Krypton-Monoschicht adsorbiert auf Graphit. (a) Kommensurable '$\sqrt{3}$-Struktur'. Die Krypton-Atome besetzen ein $\frac{1}{3}$ der Honigwabenzellen des Graphits. (b) Inkommensurable Phase [39]

die Phase inkommensurabel (siehe Abbildung 25(b)). Andere Substrate, in denen ein kommensurables Schmilzen beobachtet wurde, sind unter anderem He auf Graphit, O auf Ni(111), Xe auf Cu(110) und N_2 auf Graphit. Wir interessieren uns hier für Systeme, wo in der kommensurablen Phase, nur eins von $p = 2, 3, \ldots$ unterschiedlichen Subgitter, A, B, C, ..., von dem Adsorbat bevorzugt besetzt wird [8], während in der Schmelzphase sich die Subgitter nicht mehr unterscheiden lassen. In der flüssigen oder geschmolzenen Phase können die Subgitter mit der gleichen Wahrscheinlichkeit besetzt werden. Die Subgitterstruktur zeigt eine abstrakte interne Symmetrie Y_p, die die Subgitter permutieren läßt. Es sollen folgende Fälle betrachtet werden:

1. $p \times 1$ rechtwinklige Phasen, in denen ein Adsorbat auf einen rechtwinkligen Substrat eine Gitterkonstante in x-Achsenrichtung hat, die p-mal so groß ist wie die entsprechende Substrat-Gitterkonstante.

2. $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ kommensurable Phase, in denen z. B. ein Edelgasschicht von einem hexagonalen Substrat adsorbiert wird, wie es bei He oder Kr auf Graphit der Fall ist.

Die Grundzustände von zwei 3×1 Phasen und der $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ Phase sind in Abbildung 26 zusehen. Die volle Symmetrie dieser einfachen p-Zustandsmodelle auf einem gegebenen Gitter ist das direkte Produkt aus der internen Symmetrie Y_p und der unabhängigen Gittersymmetrie L. Eine Gruppe von Modellen, die die Phasenübergänge in solchen Systemen beschreibt, sind die sogenannten chiralen Potts- oder clock-Modelle. Der Grund, warum man die chiralen Potts- bzw. clock-Modelle

[8] Es gibt natürlich auch Systeme, in denen zwei oder mehrere Subgitter besetzt sein können.

Abbildung 26: Idealisierte Darstellung von einfachen kommensurablen adsorbierten Phasen der Ordnung $p = 3$. Die kleinen Punkte stellen die Gitterplätze des einzelnen Subgitter und dicken Punkte die absorbierten Gitterplätze dar: (a) einfaches rechtwinkliges 3×1 Phase, (b) zentrierte rechtwinklige 3×1 Phase und (c) hexagonale $\sqrt{3}\times\sqrt{3}\,R\,30°$ Phase [41]

anstatt die 'normalen' Potts- oder clock-Modelle nimmt, liegt in der Symmetrie des betrachteten Sytems. Die Symmetrie der $p \times 1$- und $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Systeme ist niedriger als die der idealen Potts- und clock-Modelle. Die chiralen clock-Modelle haben einen zusätzlichen symmetriebrechenden Term, der die abstrakten diskreten Spin-Raum der Potts-Variablen mit dem realen Raum koppelt. Die chirale Eigenschaft dieser p-Zustandsmodelle wirkt sich auf das kritische Verhalten am Phasenübergang aus, denn es verursacht ein Crossover zu Phasenübergängen, die zu anderen Universaltitätsklassen gehören als die der symmetrischen Potts- und clock-Modelle. Zum Beispiel konnte der Übergang bei Kr auf Graphit von der flüssigen zu der $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ kommensurablen festen Phase nicht in die Universaltitätsklasse des klassischen 3-Zustands-Potts-Modells eingeordnet werden. Die niedrigere Symmetrie dieser Systeme wird durch unterschiedlichen Blochwände, die die kommensurablen Bereiche voneinander trennt, verursacht. Die Ursache der unterschiedlichen Blochwände soll im nächsten Abschnitt erklärt werden.

4.2 Blochwände

Wie wir bereits wissen, besteht eine inkommensurable Phase aus mehreren kommensurablen Bereichen, die durch bestimmte Grenzflächen, die Blochwände, getrennt sind. Für die 3×1 rechtwinklige oder die $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ hexagonale kommensurable Phase sind die Blochwände $A\,|\,B$ und $B\,|\,A$ sehr unterschiedlich, auch wenn sie parallel in dieselbe Richtung orientiert sind. Die Abbildungen 27 und 28 zeigen schematisch

Abbildung 27: Schematische Darstellung der $A \,|\, B$ und $B \,|\, A$ Blochwände in einer 3×1 rechtwinkligen Phase [41]

die möglichen Blochwände für eine rechtwinklige Phase und eine hexagonale Phase. Die Abbildungen sind natürlich eine vereinfachte Darstellung; jegliche Abweichungen der adsorbierten Teilchen von ihrer idealen Adsorbtionsgitterplatz, sowie freie Plätze oder Gitterfehlstellen, wurden vernachlässigt. In den benachbarten Bereichen verschieben sich die absorbierten Atome in eine andere kommensurable Subgitterposition und/oder rotieren in eine andere Richtung. In jedem Bereich ist die lokale Dichte kommensurabel. Die Überschußdichte wird nur von den Blochwänden getragen. Die Blochwände zwischen verschiedenen Bereichen kommensurabler Phasen haben für $p \leq 3$ unterschiedliche Grenzflächenspannungen, die von ihrem Orientierungssinn abhängen. Zum Beispiel könnte eine $A \,|\, B$ Wand (zum Beispiel, parallel zu der y-Achse) eine andere Spannung haben als die entsprechende $B \,|\, A$ Wand. Durch die Symmetrie der Subgitter sind die Wände $A \,|\, B$, $B \,|\, C$ und $C \,|\, A$, die alle in eine Richtung orientiert sind, äquivalent zueinander. Sie werden $[+]$ Wände genannt. Die drei anderen Wände, $B \,|\, A$ etc., sind ebenfalls zueinander äquivalent und werden $[-]$ Wände genannt. Aus den Abbildungen 27 und 28 kann man erkennen, daß diese zwei Wände entweder in einer „schweren" Form erscheinen können, wie es auf der linke Seite der Abbildungen 27 und 28 zu sehen ist, oder in einer „leichten" Form, siehe Abbildung 27 und 28, rechte Seite. Die „schweren" $[+]$ und $[-]$ Wände sind dichter bepackt als die ideale, kommensurable Oberflächenbedeckung Θ. Umgekehrt haben die „leichten" $[+]$ und $[-]$ Wände eine geringere Dichte, sozusagen eine negative Absorption. Physikalisch ist klar, daß ein „Überdruck" (oder ein exzessives chemisches Potential ξ), der die Überdeckung Θ über den kommensurablen Wert

Abbildung 28: Schematische Darstellung der Blochwände in einer $\sqrt{3} \times \sqrt{3}\,R\,30°$ kommensurablen Phase [41]

erhöht, eher schwere Wände entstehen läßt. Auf der anderen Seite würde ein „Unterdruck“, der ein geringeren Überdeckung als der idealen Überdeckung entspricht, normalerweise leichte Wände fördern. Da aber die mikroskopische Struktur der $[+]$ und $[-]$ Wände an jedem Punkt verschieden ist, haben sie unterschiedliche Grenzflächenspannungen, $\sum_+(T,\xi)$ und $\sum_-(T,\xi)$. Es sollte aber einen Ort innerhalb der kommensurablen Phasen existieren, $\xi_0(T)$, an dem die beiden Oberflächenspannungen gleich sind: $\sum_+ = \sum_-$. Dies würde einer Überdeckung entsprechen, die nahe der idealen Überdeckung liegt. Die Adsorptionen auf der [+] und [−] Wand sind verbunden mit den Abweichungen von $\sum_+(T,\xi)$ und $\sum_-(T,\xi)$. Wenn also das chemische Potential ξ über den Wert von $\xi_0(T)$ anwächst, dann würde zum Beispiel die schwere Wand, die mit der geringeren Grenzflächenspannung sein. Das heißt wiederum, daß man nicht sagen kann, ob die $[+]$ oder $[-]$ Wand die schwerere ist. Beide könnten entweder eine positive oder negative Absorption haben.
Wenn man davon ausgeht, daß es nur einen einzigen Ort $\xi_0(T)$ gibt, an dem die beiden Grenzflächenspannungen gleich sind, dann wird die Wand mit der größeren Adsorbatdichte bei $\xi_0(T)$ bevorzugt.
Für $p \times 1$ rechtwinklige Phasen gibt es $p-1$ verschiedene Blochwände mit den Grenzflächenspannungen, $\sum_{+1}, \sum_{+2}, \ldots, \sum_q \equiv \sum_{-(p-q)}$, der entsprechenden $A\,|\,B$, $A\,|\,C$, $A\,|\,D, \ldots$ Wände. Wenn die Grenzflächenspannung oder die überschüssige freie Energie pro Einheitslänge von einer dieser Wände groß genug ist gegenüber den anderen, dann wird die Wand instabil und spaltet sich in zwei oder mehrere getrennte Wände eines anderen Typs auf. Zwischen die neu entstandenen Wände

drängen sich ein oder mehrere Schichten eines weiteren kommensurablen Bereichs. So entsteht die fließende Phase.
Nur für den Fall $p = 2$, wo es nur eine einzige Blochwand gibt, ist die Symmetrie des Systems die gleiche wie beim Standard-Ising-Modell. Für $p = 3$ ist die Existenz von $p-1$ verschiedenen Blochwänden die Ursache dafür, daß das adsorbierte System eine niedrigere Symmetrie hat als das Standard-Potts-Modell oder das p-Zustand-clock-Modell.

4.3 Das chirale Potts-Modell

Die interne Spinsymmetrie $Y_3 = S_3$ und die Gittersymmetrie L sind für das Standard-Potts-Modell ungekoppelt. Bei einem kommensurablen Absortionssystem stellen die Subgitter A, B, C, in denen jeweils einer der drei kommensurablen Bereiche bevorzugt wird, weder die Werte der diskreten Potts-Spinvariablen, $n = 0, 1, 2$, dar, noch repräsentieren sie die Subgitter in reellen Raum. In diesem Fall sind die interne Symmetrie Y_3 und die Gittersymmetrie L voneinander abhängig. Die volle Symmetrie des Systems G ist sogar eine Untergruppe von $Y_3 \times L$.
Wenn wir die Translationen vernachlässigen, so besitzt das 3×1 rechtwinklige Gittersystem, wie es in Abbildung 26 zu sehen war, eine Symmetriegruppe mit 12 Elementen. Sechs bestehen aus den 3 zyklischen Subgittern A, B, C, kombiniert mit den zwei Symmetrieoperationen auf dem Gitter: a) die Identität, b) Spiegelung an der x-Achse. Die anderen sechs Elemente bestehen aus 3 antisymmetrischen oder seltsamen Permutationen der Subgitter, kombiniert mit den Symmetrieoperationen auf dem Gitter, die die x-Achse umkehren. Das einfachste diskrete Spinmodell, die diese Symmetrie widerspiegelt, ist das chirale 3-Zustands-Potts-Modell. Das chirale Potts-Modell beschreibt das kontinuierliche Schmelzen einer 3×1 kommensurablen Phase. Das Modell hat drei Potts-Spinvariablen,n_i, die an den Gitterplätzen i eines regulären Gitters sitzen. Jede Spinvariable kann eine der $p = 3$ Werte, $n_i = 0, 1, 2$, annehmen. Diese Spins sind in der Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos \left[\frac{2\pi}{3} (n_i - n_j + \boldsymbol{\Delta} \cdot \boldsymbol{R}_{ij}) \right] \tag{4.2}$$

gekoppelt, wobei $\boldsymbol{R}_{ij}$ der Vektor vom Gitterplatz i zum Gitterplatz j ist und $\boldsymbol{\Delta} = \Delta \boldsymbol{y}$, zum Beispiel. Wenn das chirale Feld $\boldsymbol{\Delta}$ verschwindet, wird das Modell wieder zum Standard-Potts-Modell, in dem die Spin- und die räumlichen Symmetrie unabhängig voneinander sind.
Das chirale Feld $\boldsymbol{\Delta}$ unterscheidet energetisch zwischen den linear angrenzenden Spinkonfigurationen, zum Beispiel, 012 und 210. Bei der Kopplung des Potts-Spinraumes mit den reellen Raum, erniedrigt sich die Symmetrie des Modells. Eine Variation des chiralen Feldes entspricht einer Variation des chemischen Potentials in einem adsor-

bierten System:

$$|\mathbf{\Delta}| \sim \xi - \xi_0(T) \tag{4.3}$$

Das chirale Feld ist effektiv mit einem einachsigen chiralen symmetriebrechenden Operator gekoppelt, der eine bestimmte Raumrichtung bevorzugt, nämlich die Orientierung des Vektors $\mathbf{\Delta}$. Um die chiralen Eigenschaften des Modells zu verstehen, wollen wir die Entstehung der verschiedenen Blochwände genauer untersuchen. Nehmen wir an, das das chirale Feld nur auf benachbarte Spins in Richtung der y-Achse wirkt, so kann man die Hamiltonfunktion in einen horizontalen und vertikalen Anteil aufspalten:

$$\mathcal{H} = -J_x \sum \cos \frac{2\pi}{3}(n_i - n_j) - J_y \sum \cos \frac{2\pi}{3}(n_i - n_j - \varphi)\,, \tag{4.4}$$

wobei $\varphi = \Delta \boldsymbol{y} \cdot \boldsymbol{R}_{ij}$ ist. Der Parameter $\mathbf{\Delta}$ verursacht die kontinuierliche Rotation des Phasenwinkels $\frac{2\pi}{3}n_i$ als Funktion seiner Lage entlang der y-Achse. Dies verträgt sich aber nicht mit der Bedingung, daß der Phasenwinkel diskret sein soll. Dieser Gegensatz verursacht das Erscheinen eines C - IC-Übergangs.
Je nach dem wie die benachbarten Spins zueinander stehen, ist $\Delta n = n_i - n_j$ bei ferromagnetischer Anziehung entweder 0, 1 oder $2 = -1$. Bezeichnet man mit $\Delta n = 0, 1, 2$ die Phasenwinkel des ursprünglichen Potts-Modells mit $\varphi = 0$, so sind die Phasenwinkel $n_i' = 0', 1', 2'$ die um den Winkel φ verschobenen Phasenwinkel. Abbildung 29 zeigt die energetische Lage der ursprünglichen Phasenwinkel 0, 1, 2 und die verschobenen Phasenwinkel $0', 1', 2'$ mit $\phi = 50°$. Im "normalen"

Abbildung 29: Energetische Lage der ursprünglichen und verschobenen Phasenwinkel mit $\varphi = 50°$

Potts-Modell sind die Spinpaarkonfigurationen mit $\Delta n = 1$ und 2 energetisch gleich. Da $\Delta n = 0$ die niedrigste Energie hat, werden die Spins auf dem Potts-Gitter sich mit größter Wahrscheinlichkeit alle parallel ausrichten. Da die Zustandssumme der Hamiltonfunktion (4.4) eine symmetrische Funktion ist, reicht es aus die Hamiltonfunktion nur für $\varphi = 60°$ zu betrachten. In Abbildung 28 liegt zwar $0'$ immer noch

tiefer als $1'$ und $2'$, aber die Spinpaarkonfigurationen $1'$ und $2'$ sind energetisch nicht mehr gleich. Da die Energiedifferenz zwischen 1’ und 2’ kleiner ist als die zwischen $0'$ und $2'$, wird eine bestimmte Reihenfolge der rotierenden Spins bevorzugt: z. B. 00112201200… . Die Spins rotieren gegen den Uhrzeigersinn. Diese Tatsache wird als Chiralität bezeichnet.
Da, wie gesagt, die Energiedifferenz zwischen $0'$ und $1'$ nicht so groß ist wie zwischen $1'$ und $2'$, bildet sich im ersten Fall ein leichte Blochwand und im letzteren Fall eine schwere Blochwand zwischen den kommensurablen Bereichen. Der Fall, das in der Reihenfolge eine ‘2’ rechts neben der ‘0’ auftaucht, ist sehr unwahrscheinlich, denn das wäre entgegen der Rotationsrichtung der Spins und das System müßte bei der Bildung dieser Blochwand enorm viel Energie aufbringen. Eine derartige Wand bezeichnet man auch als “superschwer” [43]. Für $\varphi > 60°$ rotieren die Spins dann wieder im Uhrzeigersinn und eine bevorzugte Reihenfolge wäre zum Beispiel: 111100002211… . Die verschiedenen Blochwände entstehen analog wie bei $\varphi < 60°$. Abbildung 30 zeigt das Phasendiagramm für das chirale 3-Zustands-Potts-Modell.

Abbildung 30: Phasendiagramm des chiralen 3-Zustands-Potts-Modells

Die kommensurable Phase dehnt sich bis zur flüssigen Phase aus. Die inkommesnurable fließende Phase existiert für tiefe Temperaturen und in der Nähe von $\varphi \simeq 60°$ bzw. $\Delta \simeq \frac{1}{2}$. C_0 und C_1 bezeichnen die kommensurablen Phasen, in denen im Mittel $\Delta n = 0$ bzw. $\Delta n = 1$ ist. Das Phasendiagramm hat zwei sogenannte Lifschitz-Punkte, in denen die inkommensurable, die flüssige und die kommensurable Phase koexistieren. An diesen Punkten haben die kritischen Exponenten α, β und γ die gleichen Werte wie das normale 3-Zustands-Potts-Modell, während der ‘mass-gap’-Exponent ν wie im Ising-Modell linear gegen Null geht.

Literatur

[1] W. Brenig: Statistische Theorie der Wärme, Springer Verlag, 2. Auflage 1983

[2] C. Kittel und H. Krömer: Physik der Wärme, R. Oldenbourg Verlag, 1989

[3] W. Greiner, L. Neise und H. Stöcker: Thermodynamik und Statistische Mechanik, Verlag Harri Deutsch, 1993

[4] D. I. Uzunov: Theory Of Critical Phenomena, World Of Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1993

[5] W. Nolting: Grundkurs Theoretische Physik, Band 4: Spezielle Relativitätstheorie, Thermodynamik, vieweg Verlag, 3. Auflage 1997

[6] L. D. Landau, E. M. Lifschitz: Lehrbuch der theoretischen Physik, Band V: Statistische Physik, Teil 1, Akademic Verlag Berlin, 5. Auflage, 1979

[7] H. Römer und T. Filk: Statistische Mechanik, VCH Verlagsgesellschaft/Weinheim [u. a.], 1994

[8] J. D. Guntun und M. J. Buckingham: *Condensation of the ideal Bose Gas as a cooperativ Transition* aus Phys. Rev. Vol. **166**, 1, p. 153 (1968),

[9] Prof. Dr. T. Fließbach: Lehrbuch zur Theoretischen Physik IV: Statistische Physik, Spektrum Akad. Vlg./Heidelberg [u. a.], 1995

[10] J. C. und P. Tolédano, World Scientific Lecture Notes in Physics, Vol. 3: The Landau Theory Of Phase Transitions, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1987

[11] J. Cardy: Cambridge Lecture Notes in Physics 5: Scaling and Renormalization in Statistical Physics, Cambridge University Press, 1996

[12] A. Z. Patashiskii und V. I. Prokrovskii: Fluctuation Theory Of Phase Transitions, Pergamo Press Ltd., 1979

[13] L. Onsager: *Phys. Rev. 65,* 117 (1944)

[14] C. N. Yang: *Phys. Rev. 85,* 808 (1952)

[15] C. Domb und M. S. Green: Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol.3, Academic Press, New York 1974, chap. 1

[16] A. J. Wakefield: *Proc. Camb. Phil. Soc.* **47**, 419-35 (1951)

[17] C. Domb: *Adv. Phys.* **9**, 149 (1960)

[18] M. F. Sykes, J. W. Essam, B. R. Heap und B. J. Hiley: *J. Math. Phys.* **7**, 1557-72 (1960)

[19] M. F. Sykes und D. L. Hunter: *J. Phys. A: Math, Nucl. Gen.* **7**, 1589-95 (1974)

[20] G. von Gehlen: Vorlesungsskript zur Thermodynamik und Statistik, WS 79/80

[21] J. M. Yeomans: Statistical Mechanics of Phase Transitions, Oxford University Press, Oxford 1983

[22] C. Domb: Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol.3 (eds. C. Domb und M. S. Green), Academic Press 1974, chap. 6

[23] R. B. Potts: Some Generalized Order-Disorder Transitions, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **48**, 106 (1952)

[24] T. Kihara, Y. Midzuno und J. Shizume: *J. Phys. Soc. Jpn.* **9**, 681 (1954)

[25] R. J. Baxter: Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Acacemic Press, London and Orlando (1982)

[26] L. Mittag und J. Stephen: *J. Phys.* A **7**, L109 (1974)

[27] B. Nienhaus, A. N. Berker, K. Riedel und M. Schick: *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 43, Nr. 11, 737 (1979)

[28] K. Riedel:The Potts and Cubic Models in Two Dimensions: A Renormalization-Group Description, *Physica* **106 A**, 110-121 (1981)

[29] F. Y. Wu: The Potts model, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982)

[30] E. Domany, M. Schick und J. S. Walker: *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1148 (1977)

[31] E. Domany und M. Schick, *Phys. Rev.* B**20**, 3828 (1979)

[32] S. Alexander: *Phys. Lett.* A**54**, 352 (1975)

[33] C. M. Fortuin und P. W. Kastelyen: *Physic* **57**, 536 (1972)

[34] J. P. Straley und M. E. Fisher: *J. Phys.* A **6**, 1310 (1973)

[35] J. B. Kogut: An Introduction to Lattice Gauge Theory and Spin Systems, *Rev. Mod. Phys.*, Vol. **51**, No 4, 659 (1979)

[36] E. Fradkin und L. Susskind: Order And Disorder In Gauge Systems And Magnets, *Phys. Rev.* D, Vol. **17**, No 10, 2637 (1978)

[37] H. N. V. Temperley und E. H. Lieb: *Proc. Roy. Soc.* A **322**, 251 (1971)

[38] A. Hintermann, H. Kunz und F. Y. Wu: *J. Stat. Phys.* **19**, 623 (1978)

[39] P. Bak: *Rep. Prog. Phys.*, Vol.45, 587 (1982)

[40] O. M. Braun und Y. S. Kivshar: "Nonlinear dynamics of the Frenkel-Kontorova model", *Physics Reports* **306**, 1-108 (1998)

[41] D. Huse und M. E. Fisher: *Phys. Rev.* B, Vol. 29, 239 (1984)

[42] S. Ostlund: *Phys. Rev.*B, Vol.24, No 1, 398 (1980)

[43] M. den Nijs in "Phase Transitions and Critical Phenomena", Vol. 12, (C. Domb und J. L. Lebowitz eds.), S.220-333, Acadamic Press, London and Orlando, 1988