

Phasenübergänge und kritische Phänomene

Jan Gerit Barth
Matrikel Nummer: 2601541

22. Oktober 2009



Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg
Seminar: Statistische Mechanik

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung kritischer Phänomene	1
1.1	Phänomenologie von Phasenübergängen	1
1.2	Ordnungsparameter, konjugiertes Feld	1
1.3	Ehrenfest Klassifikation	2
1.4	Kritische Exponenten	2
2	Landau Theorie	3
2.1	Reihenentwicklung des Thermodynamischen Potentials	3
2.2	Diskussion der Koeffizienten	3
2.3	Symmetriebrechung	4
2.4	Kritische Exponenten in der Landau Theorie	4
2.5	Korrelationsfunktion und Korrelationslänge	5
2.6	Gültigkeitsbereich: Ginzburg-Landau-Kriterium	6
3	Modell eines Ferromagneten	7
3.1	Mean-Field-Näherung des Heisenberg Modells	7
3.2	Äquivalenz zur Landau-Theorie	8
4	Zusammenfassung	8

1 Einführung kritischer Phänomene

Als Geburtsstunde der (neuzeitlichen) Theorie der Phasenübergänge kann man die Dissertationsschrift von J.D. van der Waals (1873) bezeichnen, in der eine erste qualitative Deutung des Phänomens Phasenübergang am realen Gas behandelt wird. Die Modellierung eines magnetischen Phasenübergangs wurde 1907 von P. Weiß durchgeführt, wobei sich dessen Theorie als äquivalent zum van-der-Waals Gas erweist. Dies sind Beispiele für klassische Theorien, welche durch die allgemeinere Landau-Theorie vereinheitlicht werden.

Eine mikroskopische Beschreibung wird als erstes von E. Ising gemacht (1925: Ising-Modell eines Ferromagneten). Ising konnte es nur eindimensional lösen und stellte fest, dass KEIN Phasenübergang auftritt. 1936 bewies R. Peierls die Existenz eines Phasenübergangs im Isingmodell für $d \geq 2$. Exakte Lösungen sind selbst für das relativ einfache Ising-Modell nur für ein und zwei Dimensionen möglich. Deshalb sind die klassischen Theorie weiterhin wichtig; sie vernachlässigen unwesentliche mikroskopische Details der Wechselwirkung.

1.1 Phänomenologie von Phasenübergängen

Unter der Phase versteht man eine Zustandsform eines makroskopischen Systems im thermodynamischen Gleichgewicht. Verschiedene Phasen unterscheiden sich durch unterschiedliche Werte einer makroskopischen Observablen. Beispiele:

- *Dichte*: Gas, Flüssigkeit, Festkörper
- *Magnetisierung*: Paramagnet, Ferromagnet
- *Elektrisches Dipolmoment*: Paraelektrikum, Ferroelektrikum
- *Elektrische Leitfähigkeit*: Isolator, Metall, Supraleiter
- *Viskosität*: normalfluid, suprafluid
- *Kristallstruktur*: BCC, FCC

Am intuitivsten ist bei einem solchen Vielteilchen-System die Betrachtung der freien Energie $\mathcal{F} = U - TS$. Diese muss im Gleichgewicht ein Minimum annehmen. Dafür gibt es aber offenbar zwei Möglichkeiten: Entweder wird die innere Energie möglichst klein, was eine hohe Symmetrie bedingt (Folge der Teilchenwechselwirkung); ODER die Entropie wird möglichst groß, was eine hohe Unordnung des Systems impliziert. Es stehen also stets zwei gegenläufige Tendenzen im Wettstreit, was einen „Kompromiss“ erfordert, welcher von der Temperatur abhängen wird.

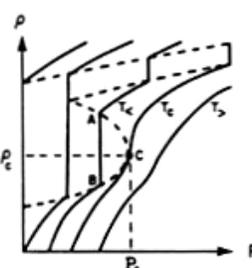
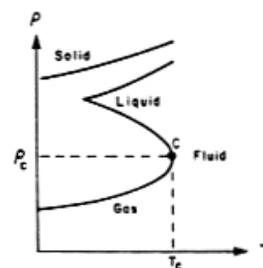
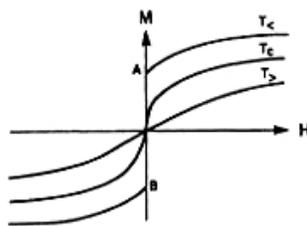
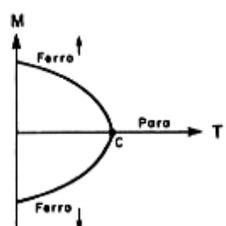
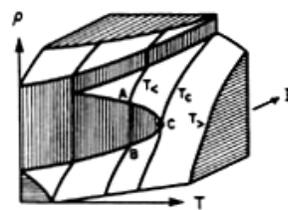
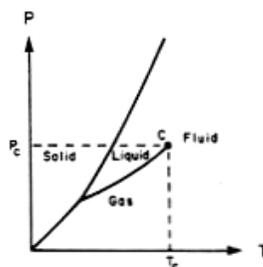
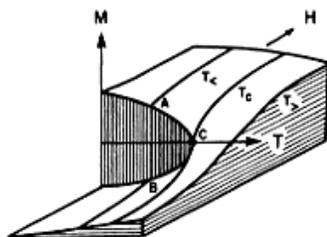
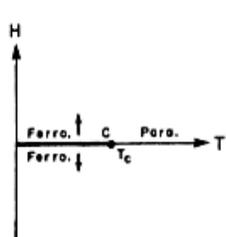
Bei hohen Temperaturen dominiert die Unordnungs- bei tiefen die Ordnungstendenz.

1.2 Ordnungsparameter, konjugiertes Feld

Betrachtet man die Phasendiagramme einer Ferromagneten und eines realen Gases, so erkennt man einige Analogitäten (vergleiche Abbildungen).

Beide Systeme werden durch die Temperatur, ein externes Feld (Magnetfeld H , bzw. Druck p) und einer zum externen Feld konjugierten Variable (Magnetisierung M , bzw. Dichte ρ), dem Ordnungsparameter, charakterisiert. Der Ordnungsparameter ist eine makroskopische Variable, die für eine Phase verschwindet und erst am Phasenübergang einen endlichen Wert annimmt. Z.B. ist die Magnetisierung oberhalb einer kritischen Temperatur T_C Null, während das System unterhalb von T_C spontan magnetisiert wird.

Die Zustandsgleichungen beider Systeme zeigen im wesentlichen ein gleiches Verhalten: Unterhalb einer kritischen Temperatur variiert eine thermodynamische Variable (M bzw. ρ) als Funktion des konjugierten Feldes über einen Koexistenzbereich diskontinuierlich gegen Null. Dieses nicht-analytische Verhalten kennzeichnet und charakterisiert den Phasenübergang.



Phasendiagramm eines Ferromagneten

Phasendiagramm einer Substanz mit fester-, flüssiger und gasförmiger Phase.

1.3 Ehrenfest Klassifikation

Sei \mathcal{L} das System beschreibende Thermodynamische Potential (etwa die freie Energie). Ein Phasenübergang heißt n -ter Ordnung, wenn alle $(n - 1)$ -ten Ableitungen von \mathcal{L} am kritischen Punkt stetig sind und mindestens eine der n -ten Ableitungen von \mathcal{L} dort eine Unstetigkeit aufweist. (Klassifikation nach Ehrenfest, 1933)

Mit wachsender Ordnung wird der Phasenübergang jedoch immer unwesentlicher, sodass nur die ersten Ordnungen von Interesse sein werden.

1.4 Kritische Exponenten

Führe für die Temperatur die dimensionslose Variable ϵ ein, die am kritischen Punkt verschwindet.

$$\epsilon = \frac{T - T_C}{T_C}, \quad \text{mit} \quad \lim_{T \rightarrow T_C} \epsilon = 0$$

Im kritischen Bereich lässt sich das Verhalten vieler physikalischer Größen G als Funktion dieser reduzierten Temperatur ϵ folgendermaßen ausdrücken:

$$G(\epsilon) = a\epsilon^\varphi(1 + b\epsilon^x + \dots).$$

Für $\epsilon \rightarrow 0$ verschwinden fast alle Terme, sodass $G(\epsilon)$ in der Nähe von T_C einem Potenzgesetz genügt.

$$G(\epsilon) \propto \epsilon^\varphi \quad \text{D.h.} \quad G(\epsilon) \text{ verhält sich im kritischen Bereich wie } \epsilon^\varphi.$$

Verallgemeinert definiert man den kritischen Exponenten einer physikalischen Größe G als

$$\varphi = \lim_{\epsilon \rightarrow > 0} \frac{\log |G(\epsilon)|}{\log \epsilon} = 0 \quad \varphi' = \lim_{\epsilon \rightarrow < 0} \frac{\log |G(\epsilon)|}{\log -\epsilon} = 0$$

Es wird also unterschieden, von welcher Seite man sich dem kritischen Punkt nähert. Es muss keineswegs $\varphi = \varphi'$ gelten.

2 Landau Theorie

Ein Problem in der Statistischen Physik ist gelöst, sobald ein relevantes thermodynamisches Potential (etwa die freie Enthalpie) bestimmt ist. Da eine mikroskopische Beschreibung in höheren Dimensionen zu nicht analytisch lösbaren Gleichungen führt, wird im folgenden versucht das Thermodynamische Potential mit wenigen phänomenologischen Parametern zu approximieren. Somit sind allgemeingültige Aussagen über Phasenübergänge verschiedenster Systeme möglich.

2.1 Reihenentwicklung des Thermodynamischen Potentials

Es werden zunächst die Dichten der verschiedenen thermodynamischen Größen betrachtet:

- Ordnungsparameter: $\Phi = \int \phi(\vec{r}) d^3r$
- verallgemeinerte äußere Kraft: $K = \int \kappa(\vec{r}) d^3r$
- Thermodynamisches Potential (Landau-Funktion): $\mathcal{L}(T, K, \Phi, \dots) = \int \ell(T, \kappa(\vec{r}), \phi(\vec{r}), \dots) d^3r$

Dabei ist die Ordnungsparameterdichte die Ableitung der Potentialdichte nach der Kraftdichte $\phi(\vec{r}) = -\left(\frac{\partial \ell}{\partial \kappa}\right)$. Nun wird die Potentialdichte in einer Potenzreihe entwickelt.

$$\mathcal{L}(T, K, \Phi, \dots) = \int \left[\ell_0(\vec{r}) - \kappa(\vec{r})\phi(\vec{r}) + a(T)\phi^2(\vec{r}) + c(T)(\nabla\phi(\vec{r}))^2 + b(T)\phi^4(\vec{r}) + \dots \right] d^3r$$

Dabei ist $\ell_0(\vec{r})$ die Potentialdichte bei verschwindendem Ordnungsparameter Φ und der zweite Summand sorgt für die richtige Beziehung zwischen Ordnungsparameter und Potential $\phi(\vec{r}) = -\left(\frac{\partial \ell}{\partial \kappa}\right)$.

Diese Entwicklung ist nicht a priori klar, deshalb sollte sie zumindest motiviert werden. Zunächst ist anzumerken, dass der Ordnungsparameter (und damit auch seine Dichte) im kritischen Punkt stetig gegen Null strebt. Somit ist auch \mathcal{L} klein in der Umgebung von $\epsilon \approx 0$. Zudem wird eine Symmetrie in $\phi(\vec{r})$ und $\kappa(\vec{r})\phi(\vec{r})$ gefordert $\mathcal{L}(T, K, \Phi) = \mathcal{L}(T, -K, -\Phi)$, d.h. ein gemeinsamer Vorzeichenwechsel der äußeren Kraft und des Ordnungsparameters soll das Potential nicht ändern. (Beispiel: Ändere gleichzeitig Magnetfeld und Magnetisierungsrichtung, Potential hat aber konstanten Wert.)

Ferner treten keine Terme der Form $\phi(\vec{r})\phi(\vec{r}')^n$ auf. Das bedeutet, dass keine Fluktuationen des Ordnungsparameters berücksichtigt werden. Dies wird sich später als ein wichtiges Problem der Landau-Theorie herausstellen.

Welche Phase bei der Temperatur T vorliegt wird durch das Minimum von \mathcal{L} festgelegt. Berechne also die Variation:

$$\delta\mathcal{L} = \int \left[-\kappa(\vec{r}) + 2a(T)\phi(\vec{r}) + 4b(T)\phi^3(\vec{r}) - 2c(T)\Delta\phi(\vec{r}) \right] \delta\phi(\vec{r}) d^3r$$

Um das Potential zu extremalisieren muss obige Variation für beliebige $\delta\phi$ verschwinden. Dies ergibt folgende Bestimmungsgleichung:

$$-2c(T)\Delta\phi(\vec{r}) + 2a(T)\phi(\vec{r}) + 4b(T)\phi^3(\vec{r}) = \kappa(\vec{r}). \quad (1)$$

2.2 Diskussion der Koeffizienten

Es wird zunächst nach Lösungen der Form $\kappa(\vec{r}) = \kappa$ und $\phi(\vec{r}) = \phi$ gesucht. Damit lautet die Bestimmungsgleichung:

$$\phi \cdot (2a(T) + 4b(T)\phi^2) = \kappa. \quad (2)$$

Betrachtet man einen spontanen Phasenübergang (ohne äußere Kraft, $\kappa = 0$), so erhält man die Lösungen:

$$\phi_0 = \begin{cases} 0 & , a(T) > 0, \quad \epsilon > 0 \\ 0, \pm \sqrt{-\frac{a(T)}{2b(T)}} & , a(T) < 0, \quad \epsilon < 0 \end{cases}$$

Ein Phasenübergang findet statt, wenn es neue Lösungen für den Ordnungsparameter gibt. Dies tritt also immer mit einem Vorzeichenwechsel von $a(T)$ bei $T = T_C$ bzw. $\epsilon = 0$ auf. Dies berechtigt den Ansatz des Koeffizienten $a(T) = a_0 T_C \epsilon$. Im Prinzip wäre jede ungerade Funktion in ϵ möglich, aber da $\epsilon \approx 0$ ist, ist die lineare Näherung ausreichend. Es gilt: $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi_0 = 0$ und somit als Minimumbedingung

$$\left. \frac{\partial^4 \ell}{\partial \phi^4} \right|_{\phi = \phi_0 \approx 0} > 0 \Rightarrow b(T) > 0$$

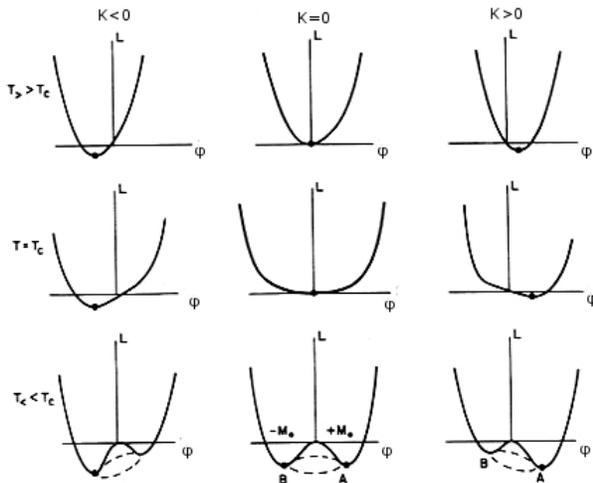
Wähle somit in der Nähe des Phasenübergangs den Ansatz $b(T) \approx b(T_C) \equiv b$.

a_0 , b und T_C sind materialspezifische Parameter. Wegen der Universalität des Ansatzes sind die Ergebnisse der Koeffizienten jedoch allgemeingültig.

$$a(T) = a_0(T - T_C), \quad b(T) = b \quad (3)$$

2.3 Symmetriebrechung

In folgender Graphik ist der Verlauf einer typischen Landau-Funktion für verschiedene Temperaturbereiche und verschiedene äußere Kräfte skizziert.



Landaufunktion $\mathcal{L}(\Phi, K, T)$

Bei $K = 0$ und $\epsilon < 0$ ist der Verlauf symmetrisch zu $\Phi = 0$.

Die Minima für $K \neq 0$ brechen diese Symmetrie jedoch.

Bewegt sich ein System von $K > 0$ zu $K = 0$, so ist die Besetzung des Minimums A wahrscheinlicher. Analog beim Übergang von $K < 0$ zu $K = 0$ das Minimum B . (Die Vorgeschichte ist wichtig!) Für $\epsilon \geq 0$ ist dies nicht der Fall.

Durch den Phasenübergang wird also die Symmetrie des Systems verringert.

2.4 Kritische Exponenten in der Landau Theorie

Berechne die verschiedenen kritischen Exponenten bei homogener Ordnungsparameter- und Kraftdichte.

- (A) Die Temperaturabhängigkeit der Ordnungsparameterdichte ergibt sich durch Einsetzen von (3) in den Ordnungsparameter ϕ_0 für $\epsilon < 0$:

$$\phi_0 = \pm \sqrt{-\frac{a_0}{2b}} |T - T_C|^{\frac{1}{2}} \Rightarrow \beta = \frac{1}{2}$$

- (B) Um die Systemantwort auf eine äußere Kraft zu erkennen, wird wieder Gleichung (2) benutzt. Da die Koeffizienten $a(T)$, $b(T)$ unabhängig von κ sein sollten, kann $a(T_C) = 0$ angenommen werden. Auf der kritischen Isotherme gilt somit $\phi^3 = \frac{\kappa}{4b}$. Dies bedeutet für die Ordnungsparameterantwort:

$$\phi = \left(\frac{1}{4b} \right)^{\frac{1}{3}} \kappa^{\frac{1}{3}} \Rightarrow \delta = 3$$

(C) Die Suszeptibilität $\chi(\vec{r}) = \left(\frac{\partial\phi}{\partial\kappa}\right)$ ergibt sich durch Ableiten von (2) nach κ .

$$2a(T)\frac{\partial\phi}{\partial\kappa} + 12b(T)\phi^2\frac{\partial\phi}{\partial\kappa} = 1$$

$$(2a(T) + 12b(T)\phi^2)\chi = 1$$

Setze für die verschiedenen Phasen die entsprechenden Ordnungsparameter, sowie die Ansätze der Koeffizienten ein und erhalte die Lösungen:

$$\chi = \begin{cases} \frac{1}{2a_0}(T - T_C)^{-1} & , \epsilon > 0 \\ \frac{1}{4a_0}(T - T_C)^{-1} & , \epsilon < 0 \end{cases} \Rightarrow \gamma = \gamma' = 1$$

(D) Die spezifische Wärme ist definiert als zweite Ableitung des Potentials nach der Temperatur. Zur Berechnung wird die quadratische Entwicklung der Potentialdichte $\ell = \ell_0 + a(T)\phi_0^2$ benutzt und wieder der Ordnungsparameter für $\epsilon \rightarrow \pm 0$ eingesetzt.

$$c_k = -T \left(\frac{\partial^2 \ell}{\partial T^2} \right)$$

$$c_K = \begin{cases} 0 & , \epsilon > 0 \\ -T_C \frac{a_0^2}{2b} & , \epsilon < 0 \end{cases} \Rightarrow \alpha = \alpha' = 0$$

Die spezifische Wärme ist also in beiden Phasen temperaturunabhängig.

2.5 Korrelationsfunktion und Korrelationslänge

Die Korrelationsfunktion beschreibt den Zusammenhang zwischen Ordnungsparameterfluktuationen an verschiedenen Orten.

$$g(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \phi(\vec{r}) \cdot \phi(\vec{r}') \rangle - \langle \phi(\vec{r}) \rangle \cdot \langle \phi(\vec{r}') \rangle \equiv \langle [\phi(\vec{r}) - \langle \phi(\vec{r}) \rangle] \cdot [\phi(\vec{r}') - \langle \phi(\vec{r}') \rangle] \rangle$$

Separiere zur Berechnung der Erwartungswerte den kraftfreien Anteil H_0 des Hamiltonoperators.

$$H = H_0 - \int \kappa(\vec{r}') \phi(\vec{r}') d^3 r'$$

Schreibe den Erwartungswert der Ordnungsparameterdichte in kanonischer Gesamtheit.

$$\langle \phi(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [\phi(\vec{r}) e^{-\beta H}] \quad , \quad Z = \text{Tr} [e^{-\beta H}]$$

Berechne damit die Antwort der Ordnungsparameterdichte auf eine Kraftdichtevariation $\delta\kappa$.

$$\begin{aligned} \delta \langle \phi \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr} [\phi(-\beta\delta H) e^{-\beta H}] - \frac{1}{Z^2} \text{Tr} [(-\beta\delta H) e^{-\beta H}] \text{Tr} [\phi e^{-\beta H}] \\ &= -\beta \left\{ \frac{1}{Z} \text{Tr} [\phi \delta H e^{-\beta H}] - \frac{1}{Z} \text{Tr} [\delta H e^{-\beta H}] \frac{1}{Z} \text{Tr} [\phi e^{-\beta H}] \right\} \\ &= -\beta \{ \langle \phi \delta H \rangle - \langle \phi \rangle \langle \delta H \rangle \} \end{aligned}$$

Wobei die Variation des Hamiltonoperators $\delta H = - \int \phi \delta \kappa$ ist.

Damit ergibt sich das Fluktuations-Dissipations-Theorem, welches die Antwort des Ordnungsparameters auf eine äußere Störung mit den inneren Fluktuationen verknüpft.

$$\delta \langle \phi(\vec{r}) \rangle = \beta \int g(\vec{r}, \vec{r}') \delta \kappa(\vec{r}') d^3 r' \quad (4)$$

Betrachte im folgenden wieder eine homogene Kraftdichte und nehme an, dass der wahrscheinlichste Ordnungsparameter mit dem mittleren Ordnungsparameter übereinstimmt $\phi_0 = \langle \phi \rangle$. Setze nun (4) in die erste Variation der Landaufunktion (2) ein.

$$\beta(2a + 12b\phi_0^2 - 2c\Delta) \int g(\vec{r}, \vec{r}') \delta\kappa(\vec{r}') d^3r' = \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta\kappa(\vec{r}') d^3r'$$

Dabei ist die Variation $\delta\kappa$ beliebig, d.h. obige Gleichung gilt bereits für die Koeffizienten.

$$\underbrace{\beta(2a + 12b\phi_0^2 - 2c\Delta)}_{\mathcal{O}} g(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (5)$$

D.h. die Korrelationsfunktion g ist Greensfunktion zum Operator \mathcal{O} . Die Lösung lässt sich mit dem üblichen Verfahren -- Fourier-Transformation, Lösung $g(\vec{k})$, Rücktransformation -- ermitteln. (Vergleiche dazu auch Yukawa-Potential.)

$$g(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{8\pi c\beta} \cdot \frac{\exp\left(-\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{\xi(T)}\right)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (6)$$

Hier wurde die Korrelationslänge $\xi(T)$ eingeführt.

$$\xi(T) = \left\{ \begin{array}{ll} \sqrt{\frac{c(T)}{a(T)}} & \epsilon > 0 \\ \sqrt{\frac{-c(T)}{2a(T)}} & \epsilon < 0 \end{array} \right\}, \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \xi = \infty$$

Setzt man hier den Ansatz (3) ein, sieht man $\xi \propto |T - T_C|^{-\frac{1}{2}}$. $\Rightarrow \nu = \nu' = \frac{1}{2}$.

Da im kritischen Punkt die Korrelationslänge divergiert, sind die verschiedenen Bereiche viel stärker korreliert.

$$g(\vec{r}, \vec{r}') \propto \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad \text{für } \epsilon \approx 0$$

Durch diese globale Korrelation wird der Phasenübergang ausgelöst!

2.6 Gültigkeitsbereich: Ginzburg-Landau-Kriterium

Wie bereits im vorigen Abschnitt bemerkt, divergiert die Korrelationslänge im kritischen Bereich. Dies ist direkt (via Gl.(4)) mit der Existenz kritischer Fluktuationen verknüpft. Jedoch war der Potentialansatz im Abschnitt 2.1 nur berechtigt, sofern die Fluktuationen des Ordnungsparameters hinreichend klein sind. Ebenfalls ist der Ansatz $\phi_0 = \langle \phi \rangle$ bei großen Fluktuationen nicht gültig. Insgesamt müssen also die Fluktuationen klein gegenüber dem Mittelwert des Ordnungsparameters sein.

$$\langle (\phi - \langle \phi \rangle)^2 \rangle \ll \langle \phi \rangle^2 \quad (7)$$

Das sollte insbesondere für alle Abstände $|r - r'| \leq \xi$ gelten. Um dies abzuschätzen wird die Korrelationsfunktion in einem d -dimensionalen Raum integriert. Zusammen mit ϕ_0 , Gl. (3) ergibt sich:

$$\langle (\phi - \langle \phi \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{V_\xi} \int_{V_\xi} g(r') d^d r' \propto \frac{1}{\xi^d} \int_0^\xi (r')^{d-1} (r')^{-2} \propto \frac{1}{\xi^d} \xi^2 \propto \xi^{2-d} \propto |T - T_C|^{\frac{d}{2}-1}$$

Außerdem gilt:

$$\langle \phi \rangle^2 \propto |T - T_C|$$

Insgesamt erhält man also das folgende Kriterium für den Gültigkeitsbereich der Landau-Theorie:

$$k |T - T_C|^{\frac{d}{2}-2} \ll 1 \quad (8)$$

Für $d > 4$ ist das Kriterium offenbar erfüllbar; für $d < 4$ dagegen (im kritischen Bereich) stets verletzt. Ausnahmen sind Systeme, in denen der Vorfaktor $k = 2bk_B T_C c^2 \left(\frac{2|a_0|}{c}\right)^{d/2-2}$ hinreichend klein ist, sodass obiges Kriterium auch bis nah an den kritischen Bereich gültig ist.

3 Modell eines Ferromagneten

Ein dreidimensionales ferromagnetisches System wird im Heisenberg Modell durch folgenden Hamilton-Operator beschrieben:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} \hat{J}_{i,j} \vec{J}_i \vec{J}_j + \frac{1}{\hbar} g_j \mu_B \sum_i \vec{J}_i \vec{B} \quad (9)$$

Dabei sind \vec{J}_i und \vec{J}_j die Spin-Operatoren der Atome an den Gitterplätzen i, j ; $\hat{J}_{i,j}$ die Austauschintegrale der Wechselwirkung zwischen den Spins und der zweite Summand beschreibt die Wechselwirkung mit einem äußeren Magnetfeld.

3.1 Mean-Field-Näherung des Heisenberg Modells

In der Mean-Field-Näherung werden bei Operatorprodukten der Form

$$\hat{A}\hat{B} = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) + \hat{A} \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \hat{B} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$$

die Fluktuationen um die Mittelwerte vernachlässigt.

Führt man noch ein effektives Magnetfeld $B_{eff} = B_0 \vec{e}_z + B_A \vec{e}_z$, $B_A = -2 \langle J_z \rangle \frac{\hbar}{g_j \mu_B} \sum_j \hat{J}_{ij}$ ein, so kann man den Hamiltonoperator folgendermaßen schreiben:

$$\mathcal{H}_{MFN} = \frac{1}{\hbar} g_j \mu_{B_{eff}} \sum_i \vec{J}_i \vec{B}.$$

Für den Operators \vec{J}_i gibt es $(2J + 1)$ Eigenwerte m_i .

$$\mathcal{H}_{MFN} = b \sum_i m_i, \quad b = g_j \mu_{B_{eff}} \quad (10)$$

Aus dem Viel-Teilchen-Problem ist also ein Ein-Teilchen-Problem geworden. Mit diesem Hamilton-Operator lässt sich die kanonische Zustandssumme analytisch berechnen.

$$Z = \left(\frac{\sinh(\beta b (J + \frac{1}{2}))}{\sinh(\frac{1}{2} \beta b)} \right)^N$$

Die Magnetisierung ergibt sich aus der logarithmischen Ableitung der Zustandssumme.

$$M(T, B_0) = \frac{1}{V\beta} g_j \mu_B \frac{\partial}{\partial b} \log(Z) = \frac{N}{V} g_j \mu_B \cdot \mathcal{B}_J(\beta g_j \mu_B J B_{eff}) \quad (11)$$

Dabei ist $\mathcal{B}_J(x)$ die (sogenannte) Brillouin-Funktion:

$$\mathcal{B}_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J}x\right)$$

Ein Phasenübergang bei Abwesenheit eines Feldes tritt auf, wenn

$$M_S \equiv M(T, 0) = M_0 \mathcal{B}_J(const \cdot M_S).$$

Es gibt offensichtlich eine nichttriviale Lösung obiger Gleichung wenn die Anfangssteigung der rechten Seite größer als 1 ist. Eine analytische Lösung ergibt die Übergangstemperatur

$$T_C = \lambda C, \quad \lambda = \frac{V}{N} \frac{2\hat{J}_0 \hbar^2}{\mu_0 (g_j \mu_B)^2}, \quad C = \frac{N}{V} (g_j \mu_B)^2 \mu_0 \frac{J(J+1)}{3k_B}. \quad (12)$$

3.2 Äquivalenz zur Landau-Theorie

Es wird nun Analog zur Landau-Theorie der kritische Bereich betrachtet, d.h. $T \approx T_C$, $B_0 \approx 0$ und $M \approx M_S$. In diesem Fall ist das Argument der Brillouin-Funktion stets klein und sie lässt sich in einer Potenzreihe entwickeln.

$$\mathcal{B}_J(x) = \frac{J+1}{3J}x - \frac{J+1}{3J} \frac{2J^2+2J+1}{30J^2}x^3 + \dots$$

Setzt man diese Entwicklung in Gl. (11) ein, und führt den zur konjugierten Kraft B_0 gehörigen Ordnungsparameter m_S (spontanes magnetische Moment) $m_S = VM_S$ ein, so erhält man

$$B_0 \approx m_S(2a(T) + 4b(T)m_S^2). \quad (13)$$

Dabei wurden folgende Koeffizienten definiert:

$$a(T) = \frac{\mu_0}{2C}(T - T_C), \quad b(T) = \frac{2J^2 + 2J + 1}{120J^2} \left(\frac{g_j \mu_B J}{k_B T} \right)^2 \left(\frac{\mu_0 T_C}{C} \right)^3$$

Vergleicht man (13) mit (2) und identifiziert ϕ mit m_S sowie κ mit B_0 erkennt man die Äquivalenz der Mean-Field-Näherung zur Landau-Theorie.

Somit können alle Ergebnisse aus Kapitel 2 direkt übernommen werden.

Vergleicht man die kritischen Exponenten aus Experimenten (etwa mit $HgCr_2Se_4$) mit den theoretischen Vorhersagen der Landau-Theorie, so ergeben sich einigermaßen gute Übereinstimmungen.

kritischer Exponent	Landau-Theorie	Experiment
β	0.5	0.34
γ, γ'	1	1.38
δ	3	4.2
ν, ν'	0.5	0.65

4 Zusammenfassung

Die Landau-Theorie ist, wie man am Beispiel des Heisenberg-Modells gesehen hat, eine Mean-Field-Theorie der Phasenübergänge. Es werden also mikroskopische Details vernachlässigt, indem etwa ein effektives Feld eingeführt wird, welches Fluktuationen des systembeschreibenden Ordnungsparameters nicht berücksichtigt. Insbesondere in niederdimensionalen Systemen sind genau diese Fluktuationen aber groß und man kann keine exakten Vorhersagen erwarten.

Der Vorteil der Landau-Theorie liegt darin, dass sie die (bereits angesprochene) Universalität von Phasenübergängen zum Ausdruck bringt. So kann ein Ferromagnet oder ein Van-der-Waals Gas mit einer einheitlichen Theorie beschrieben werden. Da die Korrelationslänge ξ am kritischen Punkt divergiert, spielen die Details der Teilchenwechselwirkung keine Rolle. Damit sind die kritischen Exponenten lediglich von der Dimension des Systems und von der Reichweite der Wechselwirkung anhängig.

Die Vorhersagen der Landau-Theorie sind nur in wenigen Spezialfällen zutreffend. Dies liegt im wesentlichen an den vernachlässigten Fluktuationen, welche jedoch am Phasenübergang — genau der Bereich, den die Landau-Theorie beschreiben soll — nicht mehr vernachlässigt werden können!

Eine Verbesserung der Theorie muss also darin liegen, Fluktuationen des Ordnungsparameters in die Beschreibung mit einzubeziehen. Dies wird durch die Ginzburg-Landau-Theorie bewerkstelligt, welche in diesem Rahmen jedoch nicht behandelt werden kann. Für fortgeschrittenere Literatur siehe [11], [12], [13] (Stichwort: Renormierungsgruppentheorie).

Literatur

- [1] L.D. Landau, E.M. Lifschitz: *Lehrbuch der theoretischen Physik V, Statistische Physik* (Verlag Hari Deutsch 1976, 8.Aufl.)
- [2] L.D. Landau, E.M. Lifschitz: *Lehrbuch der theoretischen Physik VIII, Elektrodynamik der Kontinua* (Verlag Hari Deutsch 1974, 3.Aufl.)
- [3] W. Nolting: *Grundkurs theoretische Physik 6, Statistische Physik* (Springer 2002, 4.Aufl.)
- [4] P. Papon, J. Leblond, P.H.E. Meijer: *The Physics of Phase Transitions* (Springer 1999, 4.Aufl.)
- [5] C.J. Thompson: *Classical Equilibrium Statistical Mechanics* (Springer 1999, 4.Aufl.)
- [6] P.M. Chaikin, T.C. Lubensky: *Principles of condensed matter physics* (Cambridge University Press, 1995)
- [7] J.M. Yeomans: *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (Oxford University Press, 1992)
- [8] J.W. Negele, H. Orland: *Quantum Many-Particle Systems* (Westview Press, 1988)
- [9] R.V. Chamberlin: *Mean-Field cluster model for the critical behaviour of ferromagnets* (Macmillan Magazines Ltd, 2000)
- [10] R.V. Chamberlin: *Mean-Field cluster model for the critical behaviour of ferromagnets* (Macmillan Magazines Ltd, 2000)
- [11] A.V. Glasko: *One property of the Renormalisaiongroup Operator* (Theoretical and Mathematical Physics 2004)
- [12] U. Köbler, A. Hoser: *The impact of renormalization group theory on magnetism* (The European Physical Journal B, 2007)
- [13] T. Nishino, K. Okunishi: *Density Matrix and Renormalization for Classical Lattice Models*

Phasenübergänge und kritische Phänomene

Jan Gerit Barth

Kapitel 1

Einführung kritischer Phänomene

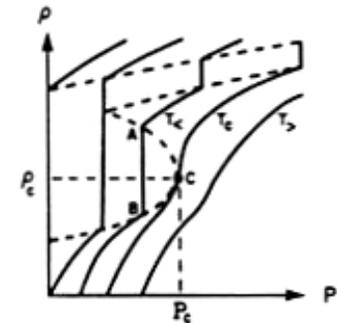
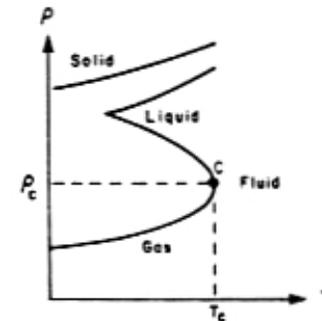
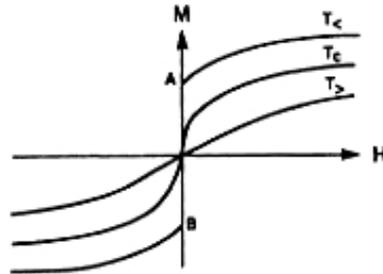
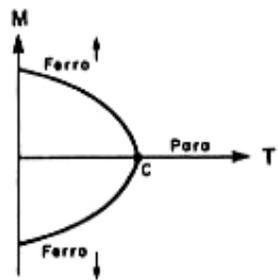
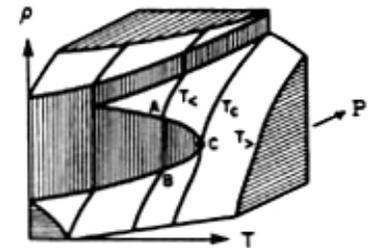
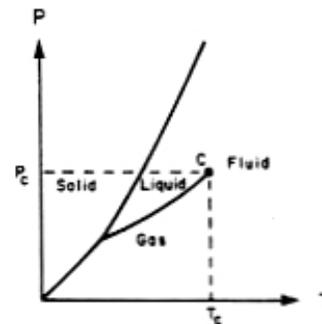
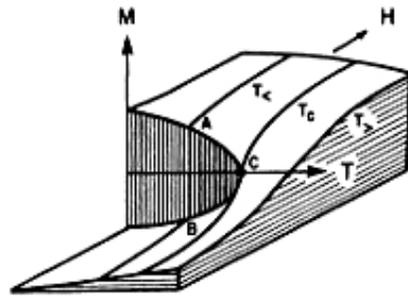
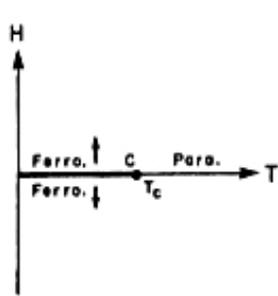
- 1873: Theorie der Phasenübergänge (*Van-der-Waals*)
- 1907: magnetischer Phasenübergang (*P. Weiß*)
- 1925: Ising-Modell für Ferromagneten (*E. Ising*)
- 1936: Existenzbeweis Phasenübergänge (*R. Peierls*)

1.1 Phänomenologie

Unterscheidung von Phasen durch Wert einer makroskopischen Variable.

- *Dichte*: Gas, Flüssigkeit, Festkörper
- *Magnetisierung*: Paramagnet, Ferromagnet
- *Elektrisches Dipolmoment*: Para-, Ferroelektrikum
- *Elektrische Leitfähigkeit*: Isolator, Metall, Supraleiter
- *Viskosität*: normalfluid, suprafluid
- *Kristallstruktur*: BCC, FCC

1.2 Ordnungsparameter, konjugiertes Feld



Phasendiagramm Ferromagnet

Phasendiagramm reales Gas

1.2 Ordnungsparameter, konjugiertes Feld

- Systeme charakterisiert durch:
 - Temperatur
 - Externes Feld (Magnetfeld, Druck)
 - Konjugierte Variable bzw. Ordnungsparameter (Magnetisierung, Dichte)
- Ordnungsparameter hat in einer Phase endlichen Wert.
- Strebt bei Annäherung an kr. Bereich nichtanalytisch gegen Null.

1.3 Ehrenfest Klassifikation

Sei L das System beschreibende Thermodynamische Potential. Z.B. die Freie Energie.

„Ein Phasenübergang heißt n -ter Ordnung, wenn alle $(n-1)$ -ten Ableitungen von L am kritischen Punkt stetig sind und mindestens eine der n -ten Ableitungen dort eine Unstetigkeit aufweist.“

(Klassifikation nach Ehrenfest, 1933)

1.4 Kritische Exponenten

- Reduzierte Temperatur: $\varepsilon = \frac{T - T_C}{T_C}$, mit $\lim_{T \rightarrow T_C} \varepsilon = 0$
- Physikalische Größe G : $G(\varepsilon) = a \varepsilon^\varphi (1 + b \varepsilon^2 + \dots)$
- In der Nähe der kritischen Temperatur: $G(\varepsilon) \propto \varepsilon^\varphi$

D.h. „ G verhält sich im kritischen Bereich wie eine Potenz der reduzierten Temperatur“

Kapitel 2: Landau-Theorie

2.1 Reihenentwicklung des Potentials

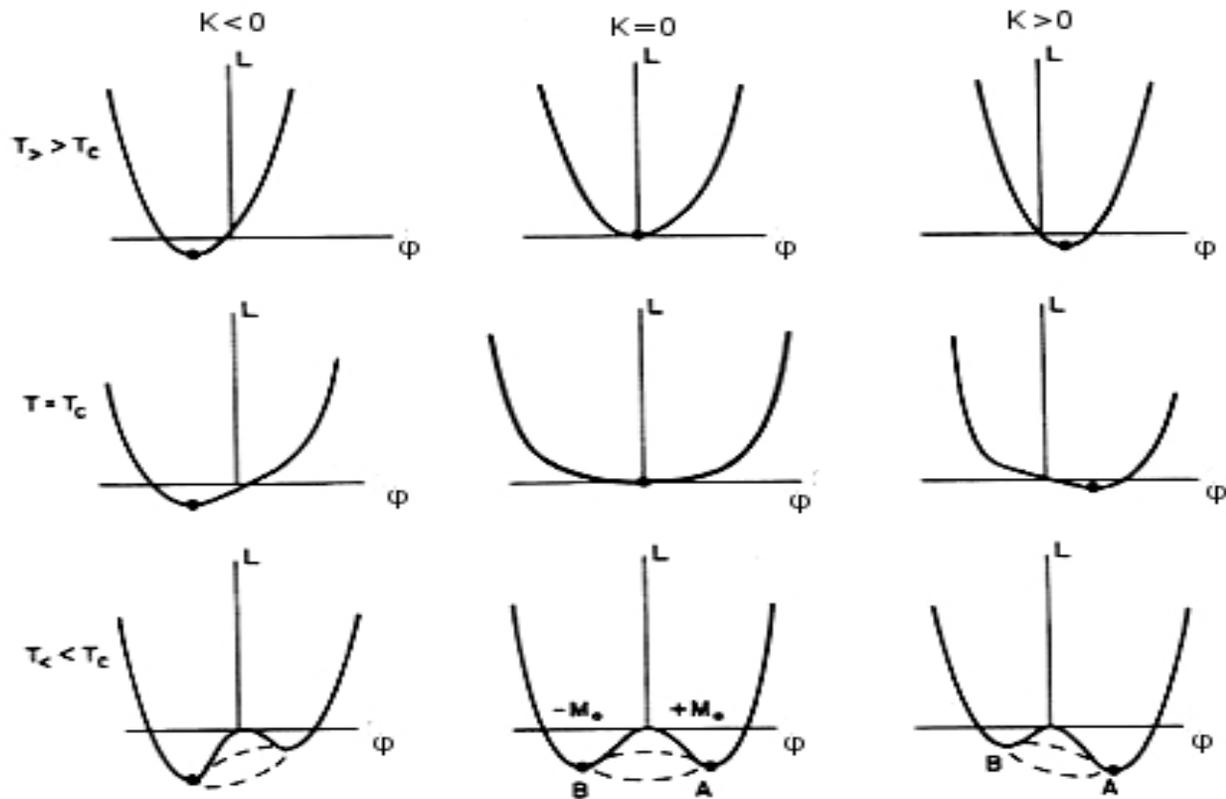
Dichten der physikalischen Größen:

- Ordnungsparameter $\Phi = \int \varphi(\vec{r}) d^3 r$
- Äußere Kraft $K = \int \kappa(\vec{r}) d^3 r$
- Landau-Funktion $L(T, K, \Phi, \dots) = \int \ell(T, \kappa(\vec{r}), \varphi(\vec{r}), \dots) d^3 r$

Reihenentwicklung des Potentials/Landau-Funktion:

$$L = \left(\int \ell_0 + a(T)\varphi^2 + b(T)\varphi^4 + \dots + c(T)(\nabla\varphi)^2 - \kappa\varphi \right) d^3 r$$

2.3 Symmetriebrechung



Formeln Kapitel 2

$$(1) \quad -2c(T)\Delta\varphi + 2a(T)\varphi + 4b(T)\varphi^3 = \kappa \quad (5) \quad O \quad g(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$(2) \quad \varphi(2a(T) + 4b(T)\varphi^2) = \kappa$$

$$(3) \quad a(T) = a_0(T - T_c), b(T) = b$$

$$(4) \quad \delta\langle\varphi(\vec{r})\rangle = \beta \int g(\vec{r}, \vec{r}') \delta\kappa(\vec{r}') d^3r'$$

$$(6) \quad g(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{8\pi c\beta} \frac{\exp\left(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{\xi(T)}\right)}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

Kapitel 3

Modell eines Ferromagneten

- Heisenberg-Operator:
$$H = -\sum_{i,j} \hat{J}_{ij} \vec{J}_i \vec{J}_j + \frac{1}{\hbar} g_j \mu_B \sum_i \vec{J}_i \vec{B}$$

- Mean-Field Näherung von Operatorprodukten:

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B} &= (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) + \hat{A}\langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \hat{B} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \\ &\approx \hat{A}\langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \hat{B} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle \end{aligned}$$

- MFN-Heisenberg-Operator:

$$H_{MFN} = g_j \mu_B B_{eff} \sum_i m_i$$

Kapitel 3

Modell eines Ferromagneten

- Vielteilchenproblem → Einteilchenproblem
- Zustandssumme analytisch bestimmbar
- Daraus Magnetisierung als logarithmische Ableitung nach der Temperatur
- Entwickeln in eine Potenzreihe
- Einführung des spontanen magnetischen Moments $m_s = VM_s$ (Ordnungsparameter)

Kapitel 3

Modell eines Ferromagneten

Zur Landau-Theorie äquivalente Gleichung

$$m_s \left(2a(T) + 4b(T)m_s^2 \right) = B_0$$

$$a(T) = \frac{\mu_0}{2C} (T - T_C), \quad b(T) = \frac{2J^2 + 2J + 1}{120J^2} \left(\frac{g_j \mu_B J}{k_B T} \right) \left(\frac{\mu_0 T_C}{C} \right)$$

Kritischer Exponent	Landau-Theorie	Experiment
β	0.5	0.34
γ, γ'	1	1.38
δ	3	4.2
ν, ν'	0.5	0.65

Kapitel 4

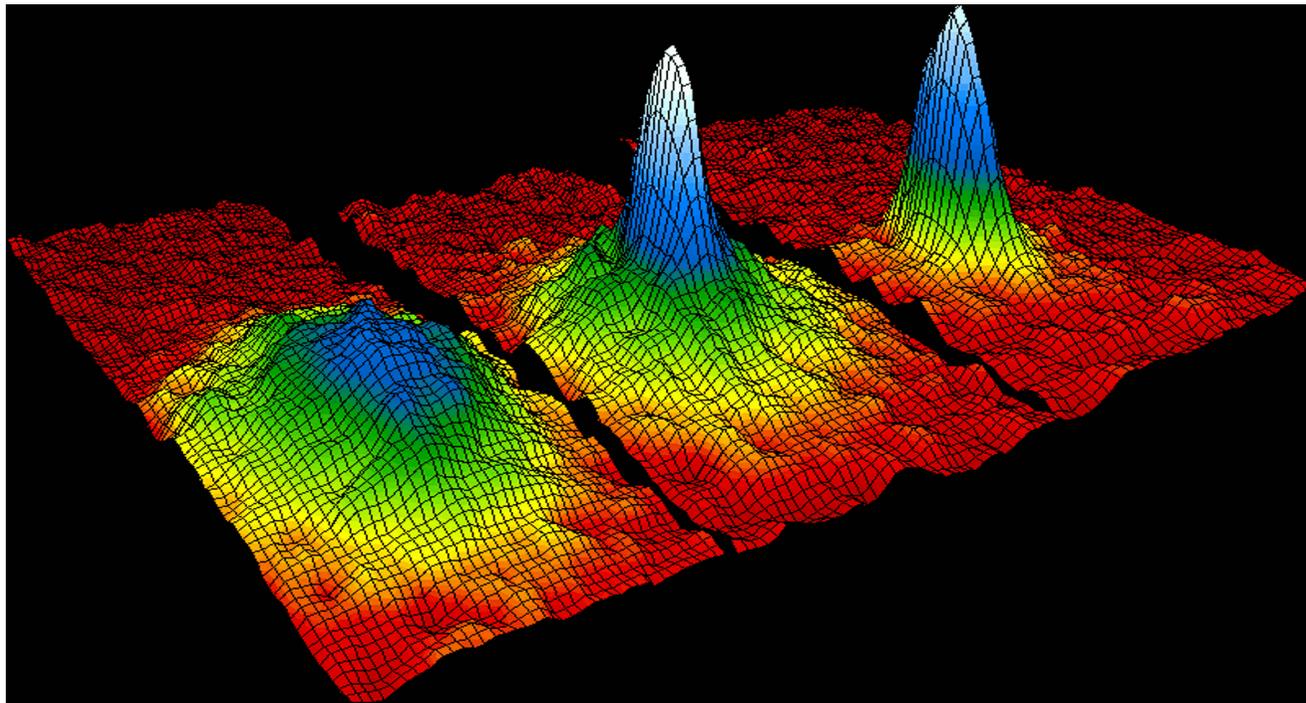
Zusammenfassung

- Landau-Theorie ist eine Mean-Field-Theorie (*d.h. Vernachlässigung mikroskopischer Details*)
- Vorteil: Universalität
- Nachteil: schlechte Vorhersagen

Weiterführende Literatur:

- A.V. Glasko: „Property of the Renormalisationgroup Operator“ (*Theoretical and Mathematical Physics, 2004*)
- U.Köbler: „The impact of renormalisation group theory on magnetism“ (*The European Physical Journal B, 2007*)

Bose-Einstein- Kondensation



Ein Seminarvortrag von Alina Wilhelm

Was ist ein Bose-Einstein-Kondensat? (kurz BEC)

Ein extremer Aggregatzustand eines Systems ununterscheidbarer Teilchen, in dem sich der überwiegende Anteil der Teilchen im selben quantenmechanischen Zustand befindet



Dabei muss gelten:

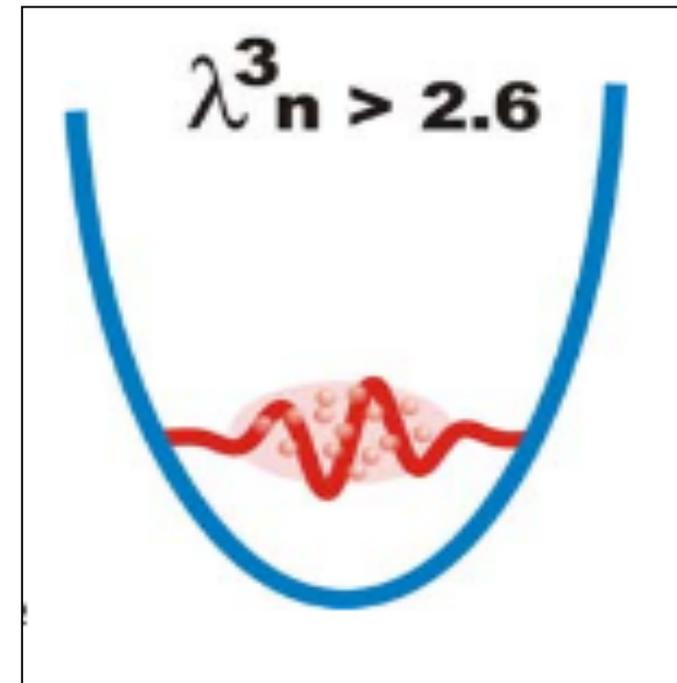
- Teilchen sind Bosonen! d.h.
ganzzahliger Spin, symmetrische Wellenfunktion
- Temperatur niedriger als T_c !

$$T_c = \left(\frac{n}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2\pi m k_B}$$

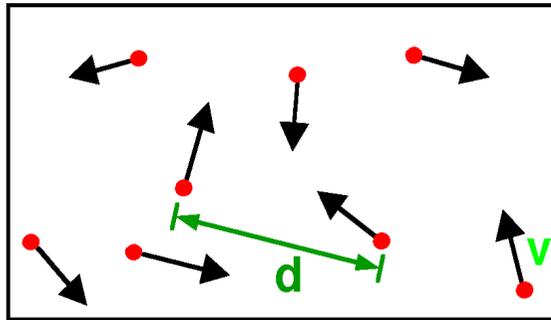
$$\zeta(3/2) \approx 2.6124$$

$$n \cdot \lambda_{dB}^3 \geq 2.612$$

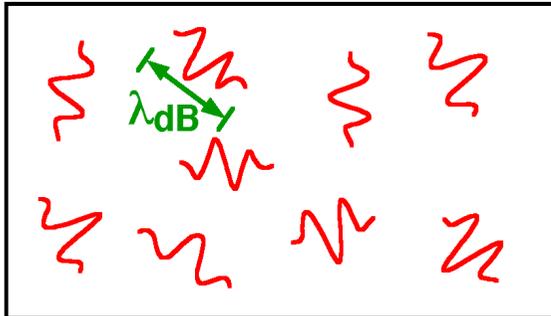
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$$



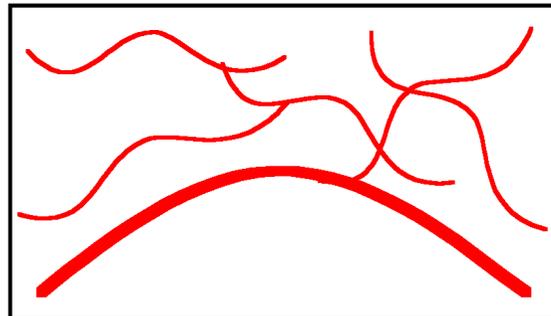
What is Bose-Einstein condensation (BEC)?



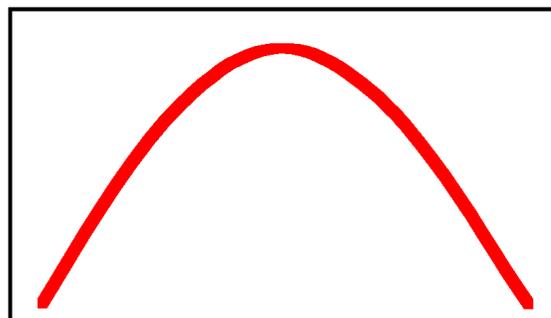
High Temperature T:
thermal velocity v
density d^{-3}
"Billiard balls"



Low Temperature T:
De Broglie wavelength
 $\lambda_{dB} = h/mv \propto T^{-1/2}$
"Wave packets"



$T = T_{crit}$:
Bose-Einstein
Condensation
 $\lambda_{dB} \approx d$
"Matter wave overlap"



$T = 0$:
Pure Bose
condensate
"Giant matter wave"

Bose und Einstein

- 1924 schreibt der indische Physiker Satyendra Nath Bose die Arbeit „Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese“
- Er schickt die Arbeit an Einstein, der diese aus dem Englischen ins Deutsche übersetzt und in der „Zeitschrift der Physik“ veröffentlicht
- Sein Kommentar am Ende: **“Boses Ableitung der Planckschen Formel bedeutet meiner Meinung nach einen wichtigen Fortschritt. Die hier benutzte Methode liefert auch die Quantenmechanik des idealen Gases, wie ich an anderer Stelle ausführen will.”**
- Im selben Jahr und ein Jahr später legt Einstein der preussischen Akademie der Wissenschaften zwei Abhandlungen vor, in denen er das Phänomen, das wir heute unter dem Namen Bose-Einstein-Kondensation kennen, beschreibt



Lösung mit:

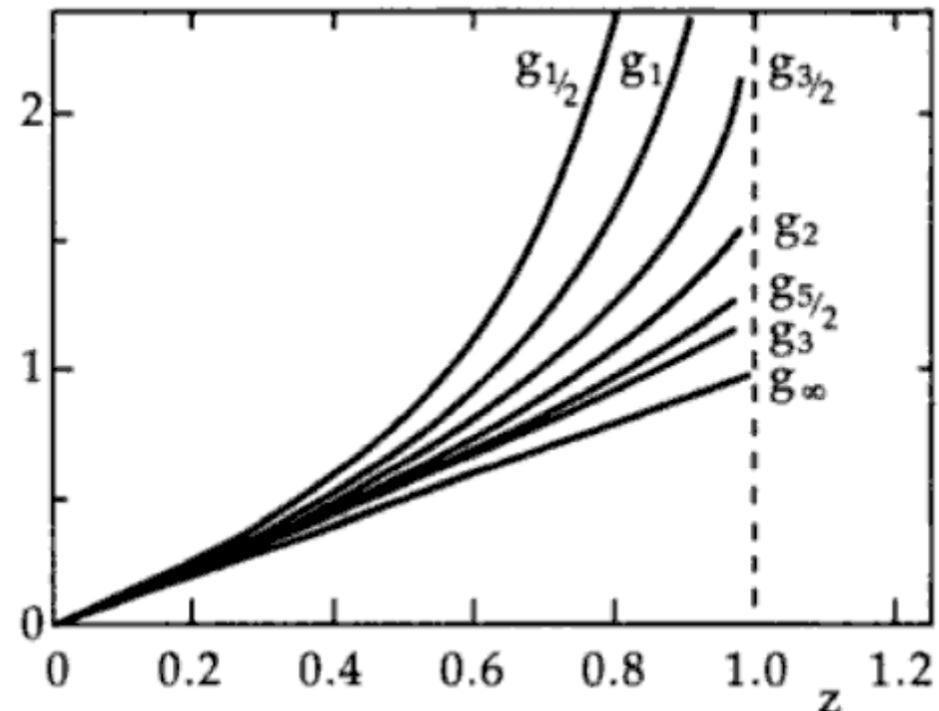
$$g_n = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1} \exp\{x\} - 1} \quad 0 \leq z \leq 1 \quad n \in \mathbb{R}$$

$$g_n(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^n}$$

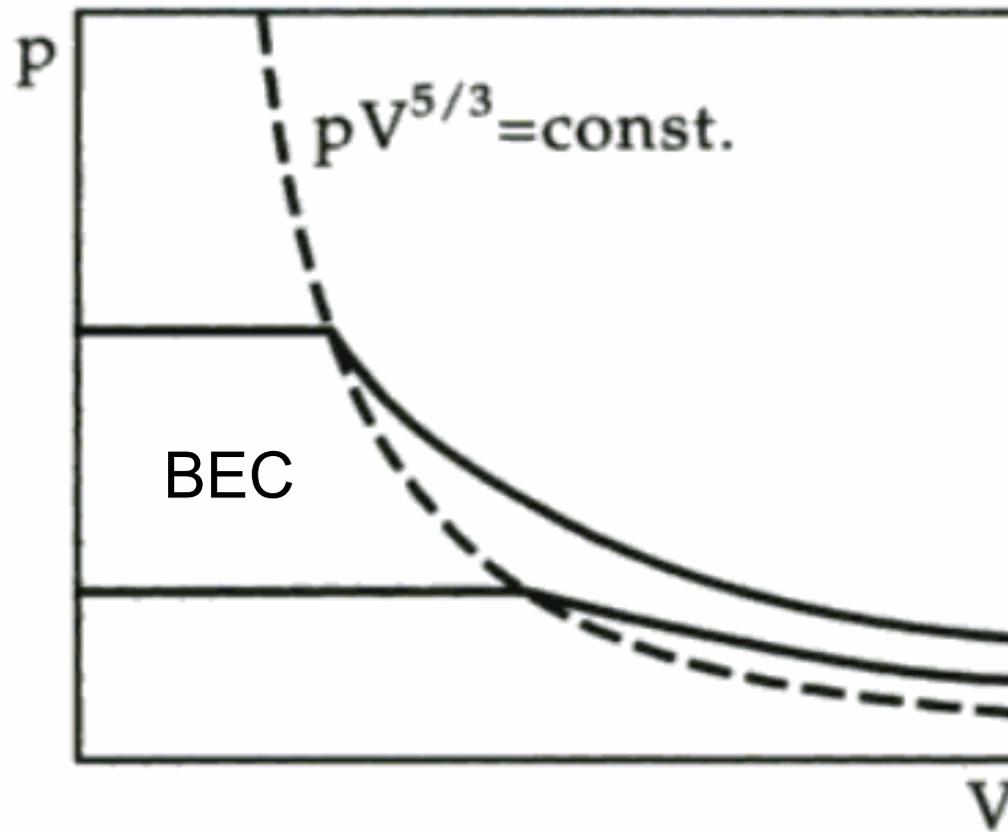
Für $z=1$, also $\mu = 0$:

$$g_n(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^n} = \zeta(n) \quad n \geq 1$$

ζ : Riemannsche Zeta-Funktion



Isothermen des idealen Bose-Gases



Experimenteller Nachweis

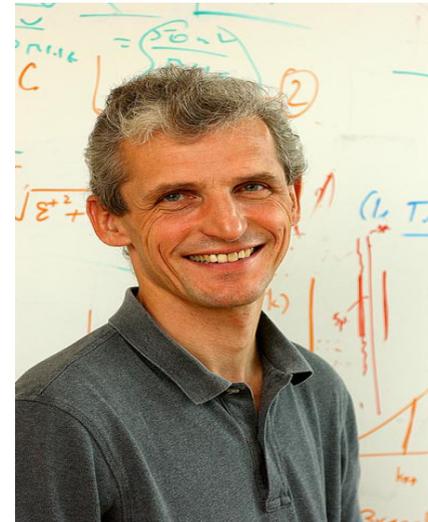
- BEC 1995 aus Rubidiumatomen erzeugt



Eric Cornell

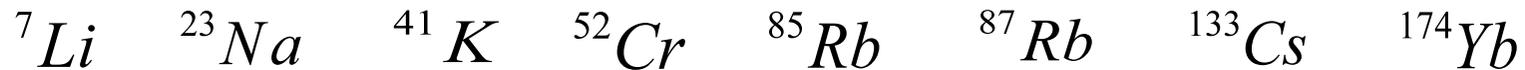


Carl Wieman



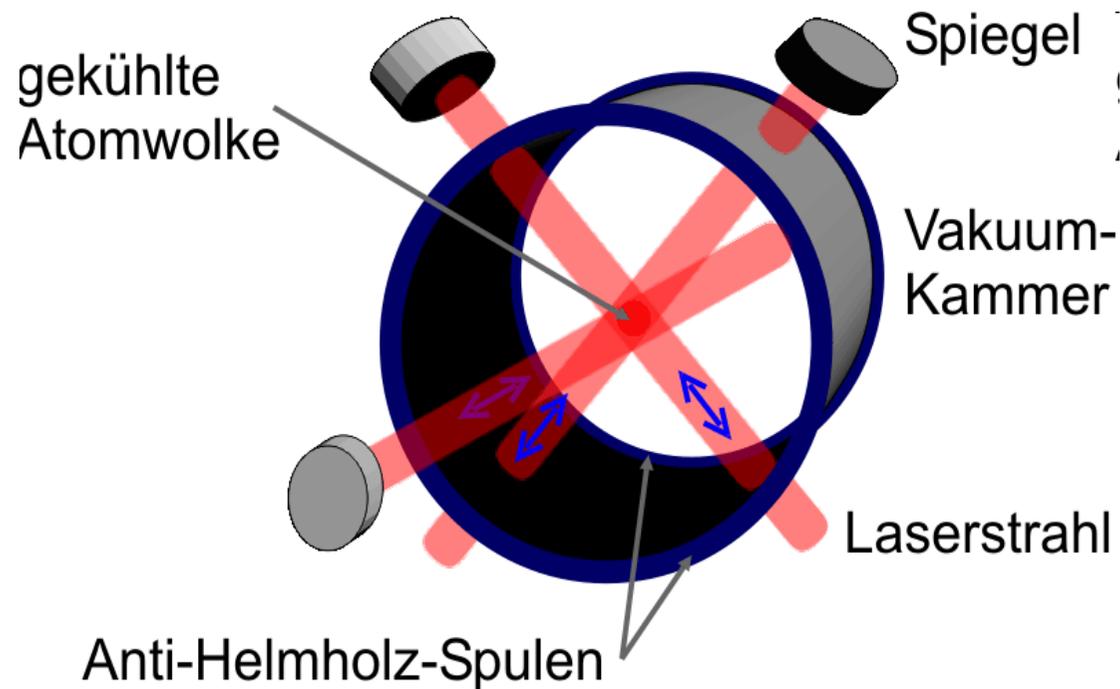
Wolfgang Ketterle

- 2001 Nobelpreis

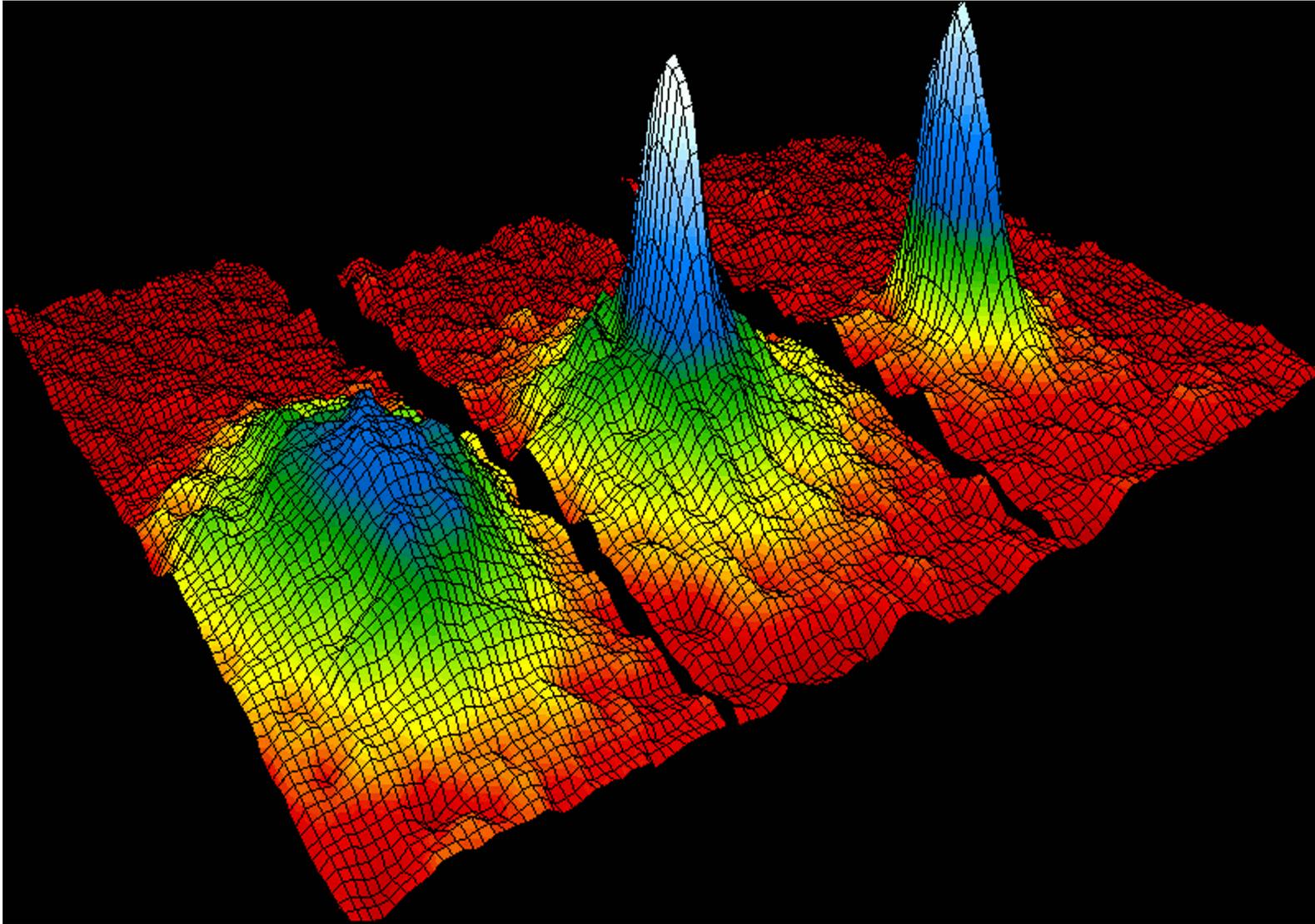


Erzeugung

- Mithilfe von Magnetooptischer Falle (MOT)
- Vorkühlung durch Laser
- Evaporatives Kühlen
- Fangen der Atome mit Magnetfeld



Geschwindigkeitsverteilung für Rubidium

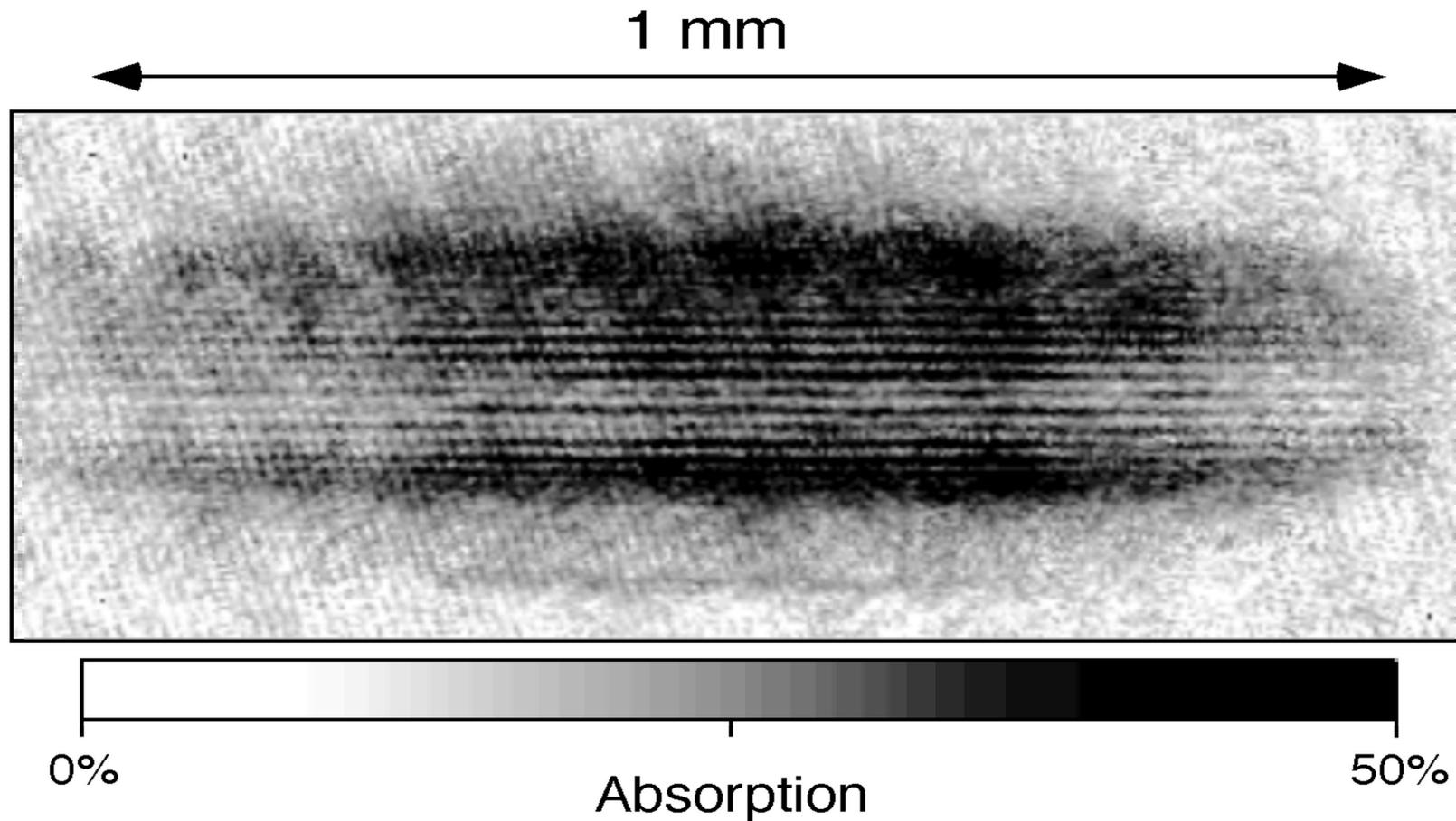


Entnommen aus Wikipedia

Wozu ist BEC gut?

- BEC ist eine fundamentale Grundlagenforschung! Sie ermöglicht eine neue Sichtweise auf die Materie!
- Phänomene wie Suprafluidität und Supraleitung resultieren daraus
- Man weiß nicht, was die Zukunft bringt. Viele Möglichkeiten sind offen, wie z.B. Quantencomputer etc.

Interferenz zweier Bose-Einstein-Kondensate



Aus dem Experiment von Wolfgang Ketterle

Quellen:

http://cua.mit.edu/ketterle_group/home.htmh

Walter Greiner, Ludwig Neise, Hörst Stöcker
„Thermodynamik und Statistische Mechanik“

http://en.wikipedia.org/wiki/Bose-Einstein_condensate

Landau Lifshitz: „Statistische Physik“

<http://mitworld.mit.edu/video/77>

Bose-Einstein-Kondensation

Die großkanonische Zustandssumme in der Quantenmechanik ist definiert als:

$$Z(T, V, \mu) = \sum_{n_k} \exp(-\beta \sum_{k=1}^{\infty} n_k (\epsilon_k - \mu)) \quad (1)$$

für die Bosonen können wir sie wie folgt umformen:

$$Z(T, V, \mu) = \sum_{n_1, n_2, \dots = 0}^{\infty} \exp(-\beta(\epsilon_1 - \mu))^{n_1} (\exp(-\beta(\epsilon_2 - \mu)))^{n_2} \dots = \prod_{k=1}^{\infty} \sum_{n_k=0}^{\infty} (\exp(-\beta(\epsilon_k - \mu)))^{n_k} \quad (2)$$

Die Summe stellt dabei die geometrische Reihe dar

$$\sum_{n_k=0}^{\infty} (\exp(-\beta\epsilon_k) \exp(\beta\mu))^{n_k} = \sum_{n_k=0}^{\infty} (\exp(-\beta\epsilon_k) z)^{n_k} = (1 - z \exp(-\beta\epsilon_k))^{-1} \quad (3)$$

mit $z := \exp(-\beta\mu)$ Fugazität

$$\Rightarrow Z(T, V, \mu) = \prod_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 - z \exp(-\beta\epsilon_k)} \quad (4)$$

Aus großkanonischer Zustandssumme können wir für das System charakteristische Größen berechnen, z. B. Teilchenzahl N :

$$N(T, V, \mu) = kT \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z = \sum_{n_k=0}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta\epsilon_k) - 1} = \langle \widehat{N} \rangle \quad (5)$$

Da die mittlere Besetzungszahl $\langle n_k \rangle$ für Zustand k nicht größer als die Gesamtanzahl der Teilchen sein darf

$$0 \leq \langle n_k \rangle \leq N \quad (6)$$

und außerdem gilt:

$$\langle \widehat{N} \rangle = \sum_{n_k=0}^{\infty} \langle \widehat{n}_k \rangle \quad (7)$$

muss folgende Beziehung erfüllt sein:

$$z^{-1} \exp(\beta\epsilon_k) = \exp(\beta(\epsilon_k - \mu)) > 1 \quad (8)$$

$$\Rightarrow \epsilon_k > \mu \quad \forall k \quad (9)$$

Das bedeutet, dass das chemische Potential stets kleiner sein muss als die Energie des niedrigsten Einteilchenniveaus $\epsilon = 0 \Rightarrow \mu < 0$ und $0 \leq z \leq 1$. Das bedeutet: Bosonen besitzen ein attraktives Potential und das Hinzufügen weiterer Teilchen zu dem System benötigt keine Energie.

Genauere Untersuchung:

Logarithmus der großkanonischen Zustandssumme:

$$\ln Z(T, V, z) = - \sum_k \ln(1 - z \exp(-\beta\epsilon_k)) \quad (10)$$

Bei großen Systemen kann man die Summe nach folgender Vorschrift durch ein Integral ersetzen:

$$\sum_k \rightarrow \int g(\epsilon) d\epsilon \quad (11)$$

mit $g(\epsilon) = \frac{d\Sigma}{d\epsilon}$ Einteilchenzustandsdichte und Σ Zahl der Zustände im Einteilchenphasenraum

$$\Sigma = \int \frac{d^3\vec{r}d^3\vec{p}}{h^3} = \frac{4\pi V}{h^3} \int p^2 dp = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \epsilon^{1/2} d\epsilon \quad (12)$$

wobei die Beziehung $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ ausgenutzt wurde.

$$\Rightarrow g(\epsilon) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2} \quad (13)$$

Der Zustand mit Energie 0 ist in dem Integral jedoch nicht erhalten und muss daher dazuaddiert werden. Damit ergibt sich für $\ln Z$:

$$\ln Z = -\frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \epsilon^{1/2} d\epsilon \ln(1 - z \exp(-\beta\epsilon)) - \ln(1 - z) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \frac{2}{3} \beta \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}}{z^{-1} \exp(\beta\epsilon) - 1} - \ln(1 - z) \quad (14)$$

Analog für Teilchenzahl:

$$N(T, V, z) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{1/2}}{z^{-1} \exp(\beta\epsilon) - 1} + \frac{z}{1 - z} \quad (15)$$

Die beiden Integralgleichungen kann man mit folgenden Standardfunktionen lösen:

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1} \exp(x) - 1} \quad (16)$$

mit $0 \leq z \leq 1$, $n \in \mathbb{R}$ und $\Gamma(n)$ die Gammafunktion.

Die Funktion $g_n(z)$ lässt sich umformen zu:

$$g_n(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^n} \quad (17)$$

für den Fall $z = 1$ also $\mu = 0$ wird die Funktion gleich der Riemannischen Zeta-Funktion:

$$g_n(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^n} := \zeta(n) \quad (18)$$

Wir erhalten damit für die beide Integralgleichungen:

$$\ln Z = \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \ln(1 - z) \quad (19)$$

mit $\lambda =: \sqrt{\frac{h^2}{2m\pi kT}}$ Thermische Wellenlänge und

$$N(T, V, z) = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{z}{1 - z} = N_\epsilon + N_0 \quad (20)$$

Der Term N_ϵ ist die Anzahl der Teilchen im angeregten Zustand, während N_0 die Anzahl der Teilchen im Grundzustand darstellt. Wichtig ist, dass die $g_n(z)$ beschränkt ist (siehe Abbildung 1)! Der Definitionsbereich ist $0 \leq g_n(z) \leq \zeta(3/2) = 2,612$. Es gibt also ein Maximum für die

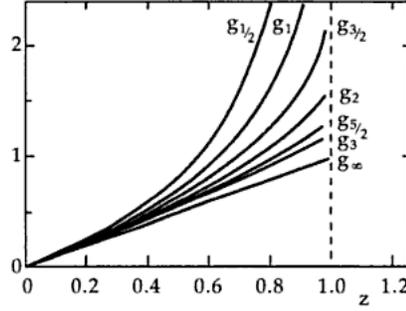


Abbildung 1: Funktionen $g_n(x)$

Anzahl der Teilchen im angeregten Zustand, nämlich: $N_{\epsilon}^{max} = \frac{V}{\lambda^3} \zeta(3/2)$

Wir betrachten nun den thermodynamischen Grenzfall, d.h. ein großes System von Teilchen, für den gilt:

$$N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, \frac{N}{V} = const$$

Beim Umstellen der Gleichung (20) ergibt sich:

$$1 = \frac{N_{\epsilon}}{N} - \frac{N_0}{N} \quad (21)$$

Wir betrachten zwei Fälle

1. Fall: $z \neq 1$ was bedeutet, dass N_0 endlich ist und damit der Ausdruck N_0/N verschwindet ($N_0/N \rightarrow 0$). Alle Teilchen befinden sich im angeregten Zustand.

2. Fall: $z = 1$ damit erreicht die Anzahl der angeregten Zustände ihr Maximum $N_{\epsilon} = N_{\epsilon}^{max}$. Damit divergiert N_0 und N_0/N wird zu einem unbestimmten Ausdruck. Die Anzahl der Teilchen im Grundzustand ist dann $N_0 = N - N_{\epsilon}^{max}$. Das bedeutet, dass der Überschuss an Teilchen in den Grundzustand übergeht. Diesen Prozess bezeichnet man als *Bose – Einstein – Kondensation!*

Beim ersten Fall gilt:

$$N_{\epsilon} < N_{\epsilon}^{max} = \frac{V}{\lambda^3} \zeta(3/2) \quad (22)$$

bzw.

$$\frac{N\lambda^3}{V} < \zeta(3/2) \quad (23)$$

Beim zweiten Fall dagegen

$$N_{\epsilon} > N_{\epsilon}^{max} = \frac{V}{\lambda^3} \zeta(3/2) \quad (24)$$

bzw.

$$\frac{N\lambda^3}{V} > \zeta(3/2) \quad (25)$$

Der Übergang findet also statt, wenn die Bedingung

$$\frac{N\lambda^3}{V} = \zeta(3/2) \quad (26)$$

erfüllt ist. Aus der Gleichung lässt sich die kritische Temperatur bestimmen, bei der die Bose-Einstein-Kondensation ansetzt. Nach der Umstellung erhalten wir:

$$T_c = \left(\frac{n}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \quad (27)$$

Aus dem großkanonischen Potential Φ , das als $\Phi = -kT \ln Z(T, V, \mu)$ definiert ist, lässt sich der Druck des Systems bestimmen:

$$p = -\frac{\Phi}{V} = - \left[-\frac{kT}{V} \ln Z(T, V, \mu) \right] = \frac{kT}{\lambda^3} g_{5/3}(z) - \frac{kT}{\lambda^3} \ln(1 - z) \quad (28)$$

Für den thermodynamischen Grenzfall verschwindet der zweite Summand, da $V \rightarrow \infty$ und $\ln(1 - z)$ endlich ist. Das bedeutet, dass die Teilchen im Grundzustand nicht zum Druck beitragen. Unterhalb der kritischen Temperatur hängt der Druck weder vom Volumen noch von der Teilchenzahl ab. Wenn man weitere Teilchen zu dem System hinzufügt, gehen diese in den Grundzustand über, ohne dass sie etwas zum Druck beitragen. Die analoge Überlegung gilt auch für das Volumen. Wenn man es verkleinert, erfolgt keine Druckerhöhung, sondern die Teilchen kondensieren im Grundzustand. Das bedeutet, dass es eine kritische Grenze für das Volumen gibt. Unterhalb dieser Grenze setzt die Bose-Einstein-Kondensation an (analog wie bei der Temperatur). Das Umformen der Gleichung (26) bei konstanter Temperatur liefert den kritischen Wert V_c

$$V_c = \frac{N\lambda^3}{\zeta(3/2)} \quad (29)$$

Die Isothermen des Bose-Gases verlaufen waagrecht für $V < V_c$. genau wie bei dem Van-der-Waals-Gas, wenn ein Phasenübergang zwischen Gas und Flüssigkeit stattfindet. Daher spricht man auch in diesem Fall von einem Phasenübergang jedoch im Impulsraum. Die Grenze im p-V-Diagramm, bei der die Bose-Einstein-Kondensation ansetzt, ist gegeben durch

$$pV_c^{5/2} = \frac{h^2}{2\pi m} \frac{\zeta(5/2)}{(\zeta(3/2))^{5/3}} N^{5/3} = const \quad (30)$$

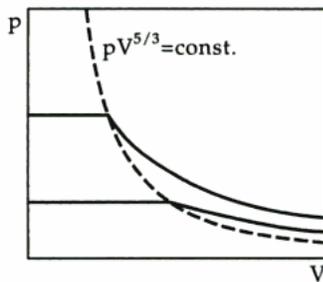


Abbildung 2: Isothermen des Bose-Gases

BEC-BCS Crossover in Fermi Gasen

Sven Meyer

06.11.09

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
1.1	Streutheorie	2
2	Molekulares BEC	2
3	Cooper-Paare	3
4	Crossover Bereich	4
4.1	Feshbachresonanz	4
4.2	Streulänge	5
4.3	Ergebnisse der QFT und Vielteilchentheorie	5
4.4	Betrachtung der Crossover Region	5
4.4.1	BCS-Regime	5
4.4.2	nahe der Resonanz	6
4.4.3	über die Resonanz	6
4.4.4	BEC-Regime	6
4.4.5	Zusammenfassung	6
5	experimentell	6
6	Ausblick	6
7	Anhang	7
8	Literaturverzeichnis	10

1 Einleitung

Fermionische Systeme und insbesondere die hier betrachteten stark verdünnten Fermigase zeigen aufgrund des Pauli-Prinzips zunächst ein zu Bosonen verschiedenes Tieftemperaturverhalten. Anders als bei einem Bose-Einstein Kondensat werden in fermionischen Systemen zunächst alle Zustände bis zur Fermi Kante besetzt und es entsteht ein degeneriertes Fermi Gas. Bei ultrakalten Temperaturen im nK Bereich finden jedoch auch die Fermionen einen Weg, durch Paarbildung eine Art Paarkondensat zu bilden. Diese Paarbildung kann auf zwei Arten erfolgen:

- stark gebundene Moleküle, die als Punkt-Bosonen wirken und ein Bose-Einstein Kondensat bilden
- schwach gebundene (korrelierte) Cooper-Paare

1.1 Streutheorie

In einem verdünnten Gas lassen sich alle Wechselwirkungen abgesehen von Stößen und Streuprozessen vernachlässigen. Um also die Wechselwirkung der Teilchen im Gas zu verstehen, muss man sich mit Streutheorie auseinandersetzen. Die Quantenmechanik erlaubt für ein kugelsymm. Potential (es sei hier vorausgesetzt) die Zerlegung der einlaufenden und auslaufenden (gestreuten) Welle in sphärische Partialwellen (siehe [1])

$$\psi_k(r) = \frac{1}{(2\pi)^{2/3}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos\theta) \left[[1 + 2ikf_l(k)] \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right] \quad (1)$$

Der erste Term entspricht der auslaufenden Welle mit Partialamplitude f_l und der Zweite der einlaufenden Welle. Im Falle ultrakalter Atome lässt sich die Reihe bei $l = 0$ abbrechen, da die therm. Wellenlänge der Teilchen sehr groß ist und somit komplizierte Potentialstrukturen gar nicht auflösen kann. Der Streuprozess lässt sich deshalb nähern durch eine Streuung an harten Kugeln und für das Streupotential lässt sich ein δ -Potential setzen. Teilchenzahl- und Drehimpulserhaltung bewirken, dass sich die Streuamplitude der auslaufenden Welle nur um eine Phase $e^{i\delta_0}$ von der der einlaufenden Welle unterscheiden darf. Die s-Wellenamplitude ergibt sich als

$$f_{l=0} = \frac{1}{k \cot(\delta_0) - ik} \quad (2)$$

Für kleine k und kleine Energien lässt sich $k \cot(\delta_0)$ entwickeln und man bricht in 0.ter Ordnung ab

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + O(k^2) \quad (3)$$

Berechnet man den totalen Wirkungsquerschnitt $\sigma_{tot} = 4\pi a^2$, so kann man die Größe a , die *s-Streuwellenlänge*, auch als Maß für die mittl. Reichweite des Potentials interpretieren.

2 Molekulares BEC

Im Falle einer starken Molekülbindung der Fermionen kann man die entstandenen Moleküle als Punkt-Bosonen auffassen. Diese bilden ein molekulares BEC, dessen Dynamik mit der Gross-Pitaevskii Gleichung beschrieben werden kann.

Diese Gleichung lässt sich aus einem Schrödingeransatz herleiten, indem man für die Wechselwirkung der Moleküle untereinander ein mean-field Potential ansetzt.

Es ergibt sich für die Molekülwellenfunktion $\phi(\vec{r}, t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{tr}(\vec{r}) + V_{WW}(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (4)$$

ϕ sei hier auf die Anzahl N der Moleküle und nicht auf 1 normiert, was durch die folgende mean-field Näherung gerechtfertigt ist.

Diese besteht zunächst in der Gesamt-Wellenfunktion

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \phi(\vec{r}_1, t) \cdots \phi(\vec{r}_N, t) \quad (5)$$

welche faktorisiert, d. h. man vernachlässigt alle Korrelationen der Wellenfunktionen untereinander. Es lässt sich zusätzlich jedes Teilchen im Grundzustand des Kondensats durch dieselbe Wellenfunktion beschreiben. Das Betragsquadrat einer auf N normierten Molekülwellenfunktion entspricht also der Teilchendichte am Ort \vec{r} . Die s-Wellen Näherung erlaubt für die Zwei-Teilchenwechselwirkung ein δ -Potential zu setzen. Es ergibt sich aus streutheoretischer Rechnung (siehe [2]) $V(\vec{r}, \vec{r}') = g \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}')$ mit $g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_m$. Eine mean-field Näherung für große Teilchenzahlen N führt auf ein mittleres Potential der Form

$$V_{WW}(\vec{r}) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_m \cdot \underbrace{|\phi(\vec{r}, t)|^2}_{n(\vec{r}, t)} \quad (6)$$

Letztendlich folgt die Gross-Pitaevskii Gleichung, welche den Grundzustand des molekularen BEC im Rahmen einer mean-field Theorie und der s-Wellenstreuung beschreibt.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{tr}(\vec{r}) + \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_m \cdot |\phi(\vec{r}, t)|^2 \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (7)$$

Es handelt sich also um eine nichtlineare Form der Schrödingergleichung.

Da lediglich die Molekülwellenfunktionen betrachtet werden, lässt sich die Gross-Pitaevskii Theorie auf beliebige Bose-Einstein Kondensate verallgemeinern. Eine ausführliche Betrachtung findet sich in [8].

3 Cooper-Paare

Die Cooper-Paar Bindung wurde im Rahmen der BCS-Theorie (Bardeen, Cooper und Schrieffer 1957) postuliert, um den Effekt der Supraleitung zu beschreiben. Die Grundidee dieser Theorie besteht darin, dass bei beliebig kleinem attraktivem Potential der Fermi-See instabil wird gegenüber Paarbildung. Im Falle der Supraleitung wird dieses attraktive Potential durch einen Austausch virtueller Phononen gegeben. Dazu ist jedoch ein Atomgitter notwendig. Im Falle verdünnter Gase wird das Potential durch die Streuwechselwirkung gegeben.

Nimmt man eine Paarwellenfunktion an und schreibt die stationäre Schrödingergleichung in der Form

$$[T_1 + T_2 + \lambda V(1, 2)] \psi(1, 2) = E\psi(1, 2) \quad \text{mit} \quad H = H_0 + \lambda V(1, 2) \quad (8)$$

Entwickle $\psi(1, 2)$ in den Eigenzuständen des freien Hamiltonians H_0

$$\psi(1, 2) = \phi_0(1, 2) + \sum_{n \neq 0} \phi_n(1, 2) \frac{1}{E - E_n} \langle \phi_n | \lambda V | \psi(1, 2) \rangle \quad (9)$$

Unter der Annahme, dass die freien Zustände ebene Wellen sind und sich das System in einem Kasten mit großem Volumen befindet, ergibt sich nach längerer Rechnung bei $\lambda < 0$ (siehe [7]) für Fermionen nahe der Fermi-Kante :

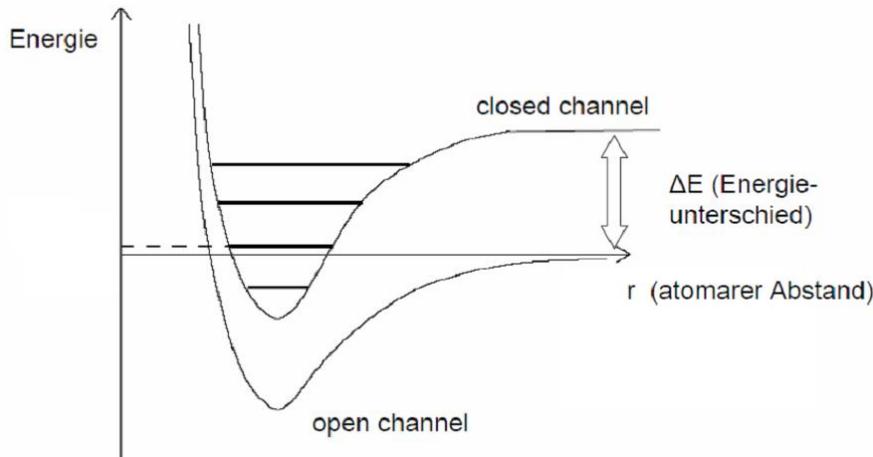
$$\kappa^2 - k_F^2 = -\frac{m\Delta}{\hbar^2} \quad \text{mit} \quad \Delta = \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \exp\left(-\frac{4\pi^2}{k_F |\lambda| |u(k_F)|^2}\right) \quad (10)$$

Diese Gleichung sagt aus, dass der Grundzustand zweier gepaarter Fermionen (repräsentiert durch κ^2) energetisch niedriger liegt als der Grundzustand der einzelnen Fermionen an der Fermi-Kante. Daher tritt aus energetischen Gründen eine Paarbildung ein (bei einer beliebigen attraktiven Wechselwirkung). Der Effekt ist jedoch keine Zweiteilchen-WW sondern ein Vielteilcheneffekt, was genauere Rechnungen [2] zeigen.

4 Crossover Bereich

4.1 Feshbachresonanz

Die Feshbachresonanz ist ein Resultat aus der Kernphysik (Herman Feshbach 1958), welche sich auf die Theorie der ultrakalten Atome verallgemeinern lässt. Es handelt sich dabei um eine resonante Kopplung zwischen einem Streuzustand (*open channel*) und einem gebundenen Molekülzustand (*closed channel*). Man betrachte zwei freie streuende Teilchen mit ihrem Streupotential, dem *open channel*. (hier durch ein Lenard-Jones Potential gegeben, siehe [4]). Der gebundene Molekülzustand (das Potential, das vorliegen würde, wenn die Fermionen zu einem Molekül gebunden wären) ist mit mehreren gebundenen Zuständen auch als Lenard-Jones Potential aufgefasst (siehe Abb 1). Wenn jetzt die kin. Energien der einzelnen Fermionen beim Streuprozess in Summe genau auf einen der gebundenen Zustände des *closed channels* „passt“, gibt es eine resonant überhöhte Wechselwirkung und die streuenden Fermionen bilden ein Molekül. Wenn der Fall vorliegt, dass *open channel* und *closed channel* unterschiedliche magnetische Momente μ_i haben, kann durch ein äußeres Magnetfeld der *closed channel* gegenüber dem *open channel* verschoben werden (Zeeman Shift $\Delta\mu \cdot B$) und auf diese Weise „künstlich“ immer ein gebundener Zustand mit der Summe der kin. Energien der Streupartner zur Deckung gebracht werden. Ebenfalls kann die Kopplung der Fermionen im Paar durch das äußere Feld beliebig verändert werden, was in nächsten Abschnitt von Bedeutung ist.



4.2 Streulänge

Die Streulänge zeigt eine reziproke Abhängigkeit vom äußeren Magnetfeld, gegeben durch:

$$a(B) = a_0 - \frac{C}{2\mu_{atom}(B_0) - \mu_{molekuel}(B_0)} \cdot \frac{1}{B - B_0} \quad \text{mit der Resonanz } B_0 \text{ und } C = const. \quad (11)$$

Dieser Zusammenhang ergibt sich durch eine Zerlegung des Gesamtilbertraumes \mathcal{H} in zwei Unterräume \mathcal{H}_P und \mathcal{H}_Q , die den *closed-* und den *open channel* beschreiben. Die Rechnung ist in [6] zu finden. An der Formel ist erkennbar, dass $a(B)$ in der Feshbachresonanz $B = B_0$ divergiert und im Unendlichen das Vorzeichen wechselt.

4.3 Ergebnisse der QFT und Vielteilchentheorie

Nach QFT und Vielteilchentheorie (siehe [2]) der ergeben sich für den gap Δ und das chem. Potential μ in den Grenzbereichen folgende Gleichungen:

BEC-Regime:

$$\mu = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\pi\hbar a}{m}n \quad (12)$$

$$\Delta = \sqrt{\frac{16}{3\pi} \frac{E_F}{k_F a}} \quad (13)$$

BCS-Regime:

$$\mu = E_F \quad (14)$$

$$\Delta = \frac{8}{e^2} \exp\left(\frac{-\pi}{2k_F |a|}\right) \quad (15)$$

$$V_{WW}(\vec{r}) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} an(\vec{r}) \quad (16)$$

Man kann diese Formeln auch intuitiv verstehen. Das chem. Potential auf der BEC-Seite ist gegeben durch einen Bindungsenergieterm $-\frac{\hbar^2}{2ma^2}$ der Fermionen im Molekül und einem Wechselwirkungsterm der Moleküle untereinander. Auf der BCS-Seite dominiert das Pauli-Prinzip unter den Wechselwirkungen und so entspricht μ dem eines entarteten Fermigases. Δ entspricht im BCS-Regime dem errechneten Resultat. Auf der BEC-Seite hat es jedoch keine anschauliche Bedeutung mehr und ergibt sich lediglich formal aus der Herleitung (siehe [2])

4.4 Betrachtung der Crossover Region

Die oben angegebenen Formeln können nun in den Crossover-Bereich zwischen beiden Regimes extrapoliert werden.

4.4.1 BCS-Regime

$a(B)$ ist betragsmäßig klein und negativ. Es liegt ein leicht attraktives Wechselwirkungspotential zwischen der Fermionen vor und damit ist die Voraussetzung zur BCS Theorie erfüllt. Es handelt sich um ein Kondensat aus Cooper-Paaren. (siehe Abb. 1)

4.4.2 nahe der Resonanz

$a(B)$ divergiert in negative Richtung und die attraktive Wechselwirkung nimmt stark zu. Bei Erreichen eines kritischen Wertes bilden sich Moleküle aus den Fermionen. (siehe Abb. 2)

4.4.3 über die Resonanz

Es taucht nun in der Wechselwirkung (chem. Potential) ein Bindungsenergieterm auf. $a(B)$ hat im Unendlichen das Vorzeichen gewechselt und die Wechselwirkung zwischen den Molekülen wird stark repulsiv, die Fermionen sind jedoch in den Molekülen gebunden. (siehe Abb. 3)

4.4.4 BEC-Regime

$a(B)$ ist betragsmäßig klein und positiv. Es liegt eine große Bindungsenergie zwischen den Fermionen im Molekül vor und eine leicht repulsive Wechselwirkung der Moleküle untereinander. Es handelt sich also um ein BEC aus Molekülen, die sich leicht abstoßen, damit das Kondensat weiterhin eine negative Kompressibilität besitzt und nicht kollabiert. (siehe Abb. 4)

4.4.5 Zusammenfassung

Die Kopplungsstärke lässt sich durch ein äuß. Magnetfeld beliebig verändern, was von allem im Zusammenhang $V_{WW}(\vec{r})$ $a(B)$ begründet liegt. Es lässt sich somit durch Veränderung von B der gesamte Crossover „durchfahren“.

Sieht man den Crossover als Phasenübergang an, so zeigt der folgende Graph (siehe Anhang Abb. 5) den Verlauf der beiden Ordnungsparameter μ (BEC-Seite) und Δ (BCS-Seite). Man erkennt, dass es sich um glatte Funktionen handelt und damit um einen Phasenübergang der Ordnung 2.

5 experimentell

Der Verlauf der Streulänge in Abhängigkeit der Magnetfeldstärke lässt sich experimentell bestimmen. Im Anhang befindet sich ein Resultat aus der Gruppe von Wolfgang Ketterle (MIT) (siehe Abb. 6 und [10]):

Man erkennt, dass der theoretische Verlauf durch die Messung deutlich wiedergegeben wird.

6 Ausblick

Ein Studium des Crossovers kann helfen, extreme Materiezustände, wie sie in Neutronensternen oder im Quark-Gluon-Plasma vorliegen, besser zu verstehen. Es handelt sich in beiden Fällen um ein Cooper-Paar-Kondensat aus Quarks, wobei die notwendige attraktive Wechselwirkung durch Gluonenaustausch gegeben ist. Die Möglichkeit, die Kopplung zwischen Cooper-Paaren mit einem äußeren B-Feld zu verändern und insbesondere zu verstärken, kann helfen, die Prozesse in Hochtemperatursupraleitern, in denen Cooper Paare wesentlich stärker gebunden sind, künstlich zu erzeugen und zu studieren. (siehe [11]) Aber auch der Crossover selbst ist immer noch ein sehr aktuelles Forschungsgebiet sowohl in der Theorie als auch im Experiment.

7 Anhang

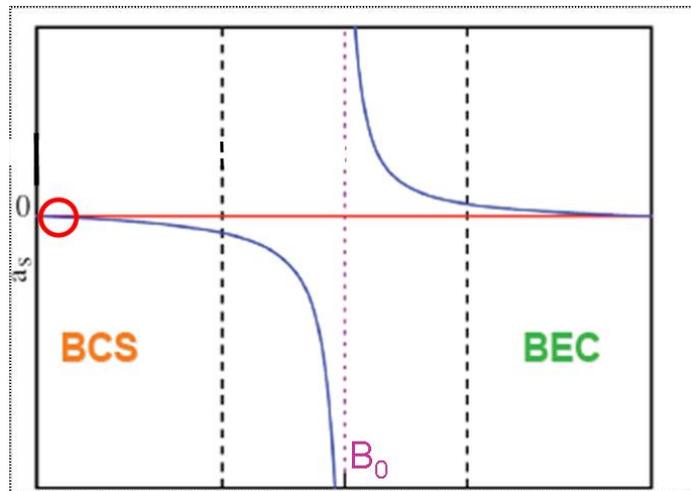


Abbildung 1: BCS-Regime

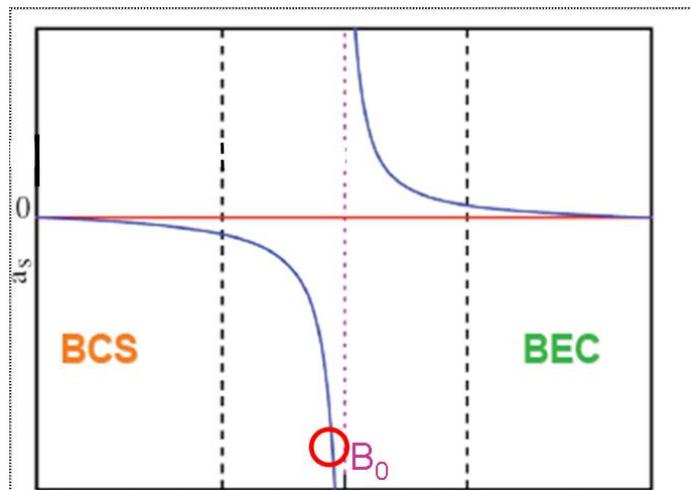


Abbildung 2: nahe der Resonanz

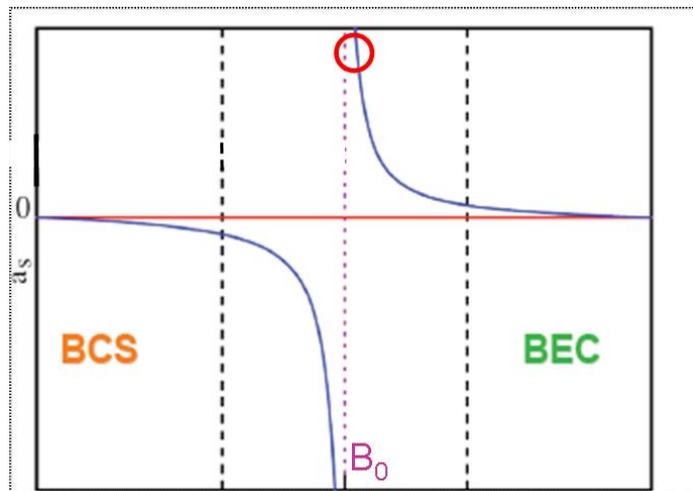


Abbildung 3: über die Resonanz

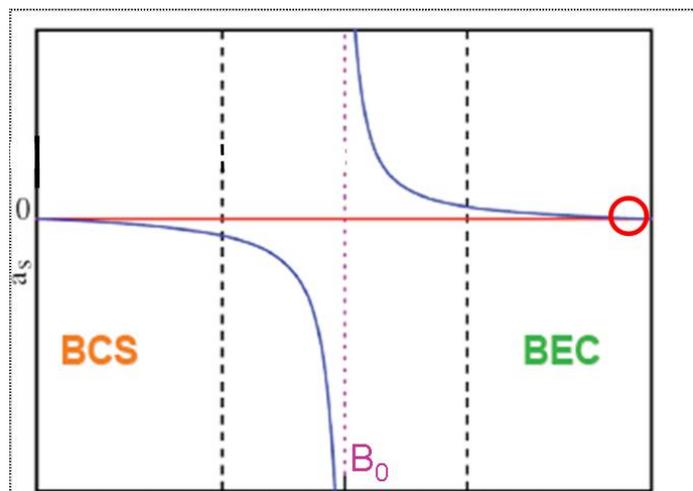


Abbildung 4: BEC-Regime

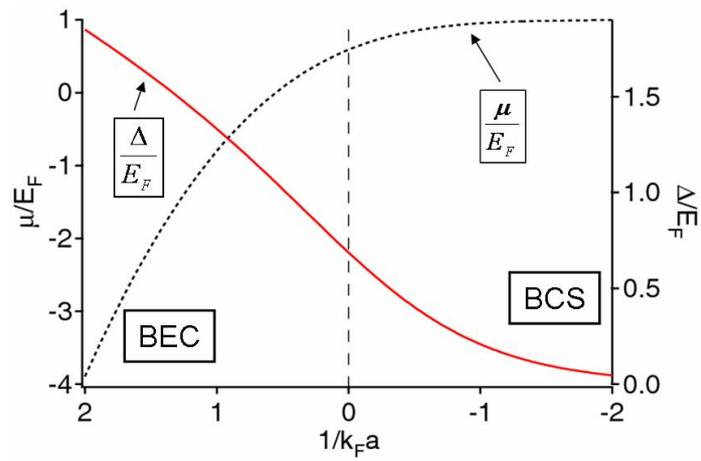


Abbildung 5: Ordnungsparameter

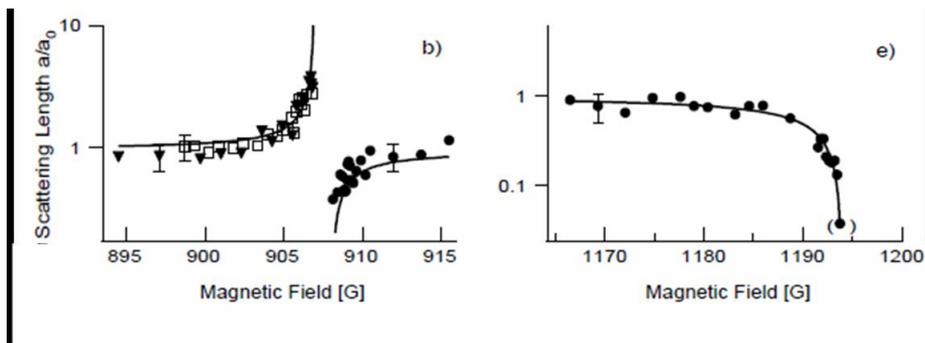


Abbildung 6: Messung der Streulänge in Abhängigkeit des Magnetfelds

8 Literaturverzeichnis

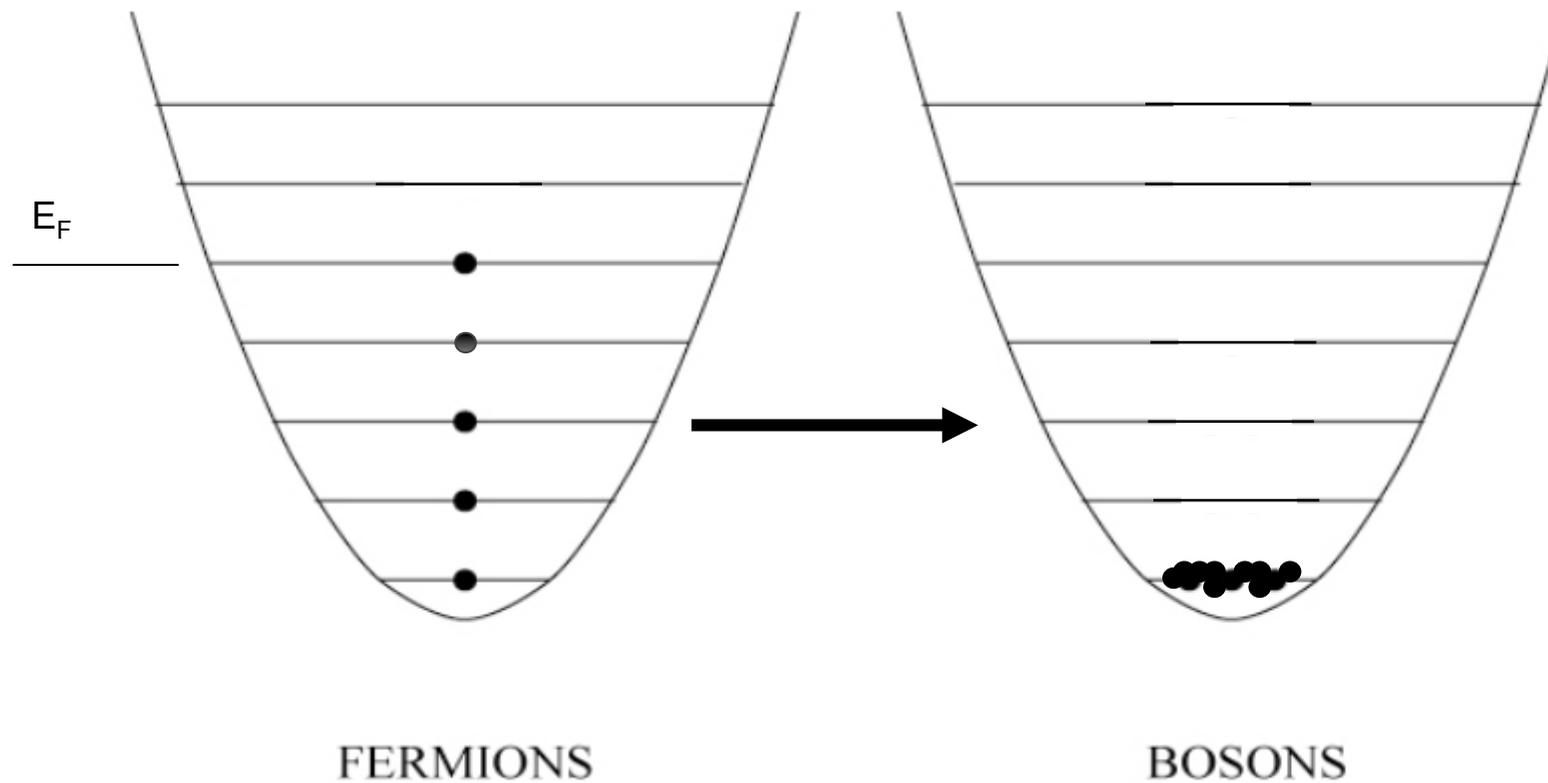
Literatur

- [1] Sakurai: *Modern Quantum Mechanics*, chapter 7
- [2] Wolfgang Ketterle, Martin W. Zwierlein *making, probing and understanding ultracold fermi gases*, Course CLXIV, Varenna, 20-30 June 2006
- [3] Allan Griffin *Lectures, Quantum and Atom Optics Summer School*, Canberra, Nov. 28 - Dec.3 , 2004
- [4] Ingrid Bausmerth, Vortrag *Feshbach Resonances, Control of interactions in Ultracold Gases*
- [5] Andre Wenz, *BEC nahe Feshbach Resonanzen*, Vortrag Seminar ultrakalte Quantengase WS 2006/07 (Kirchhoffinstitut Universität Heidelberg)
- [6] A.Moerdijk, B.J. Verhaar, A. Axelsson, *Phys. Rev. A*, 51(1995)
- [7] Alexander L. Fetter, John Dirk Walecka, *quantum theory of many particle physics*, Mc Graw Hill Publishing Company (1971)
- [8] Lev Pitaevskii, Sandro Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Oxford University Press (2003)
- [9] Stefan Keßler, *The Gross-Pitaevskii equation and the Hydrodynamik expansion of a BEC*, talk university of heideberg, may 27, 2008
- [10] S.Inouye, M. Andrews, J. Stenger, H. Miesner, D. Stamper-Kurn, W. Ketterle; *Phys. Rev. Lett.* : 82, 12 (1998)
- [11] Janne Denskat, Rico Otto *BCS-BEC Übergang*, Seminar „Makroskopische Quantenphänomene“ im SS 04, Universität Freiburg
- [12] wikipedia.org, Artikel: *fermi gases, feshbach resonance, scattering length, Gross-Pitaevskii equation, mean field theory, cooper pairs, BCS theory*

Ultrakalte Quantengase

BEC-BCS crossover in Fermi Gasen

Sven Meyer



**Tiefe Temperaturen:
Heute...**

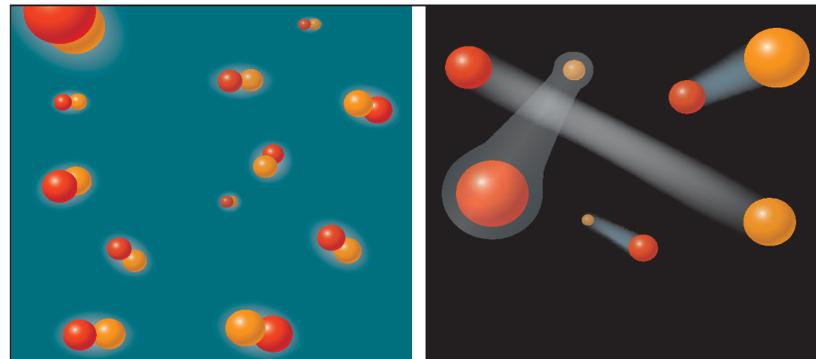
**Tiefe Temperaturen:
BEC (letzte Woche)**

1.1 Paarbildung

- Paare aus Fermionen: ganzzahligen Spin und damit Bosonen
- BEC aus Paaren von Fermionen
- Möglichkeiten:

stark geb.
Moleküle

BEC



schwach geb.
Cooper Paare

BCS

1.2 ein wenig Streutheorie

- WW der Fermionen untereinander durch Streuprozesse
- Wellen-Fkten der Ausgangsteilchen:

$$\psi_k(r) = \frac{1}{(2\pi)^{2/3}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} P_l(\cos(\theta)) \left[[1 + 2ikf_l(k)] \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{i(kr-l\pi)}}{r} \right]$$

(Partialwellenentwicklung für kugelsymm. Potential)

- Ultrakalte Temp. : Abbruch bei $l = 0$ (nur s-Wellenstreuung trägt bei)
- entspricht Streuung an kugelsymm. Pot.
- Teilchenzahl und Drehimpulserhaltung → auslaufende Welle darf sich nur um Phase $\delta_0(k)$ von einlaufender Welle unterscheiden

Streulänge

- Partialwellenamplitude s-Welle: $f_{l=0} = \frac{1}{k \cot(\delta_0) - ik}$
- Entwickle für sehr kleine k in 0-ter Ordnung: $k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + O(k^2)$
- Totaler Wirkungsquerschnitt: $\sigma_{tot} = \int \frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} d\Omega = \int |f_{l=0}|^2 d\Omega \approx 4\pi a^2$

(Streulänge entspricht Maß für die Reichweite des Streupotentials)

- $k_F a$ bzw. $\frac{1}{k_F a}$ dient Parameter des Crossovers

2.1 Molekulares BEC

- Stark gebundene (molekulare Fermion-Paare)
- Molekulares BEC
- kritisches attraktives Potential nötig
- Dynamik beschrieben durch Gross-Pitaevskii Gleichung

Verwendete Formeln

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{tr}(r) + V_{ww}(r) \right] \phi(r, t)$$

$$V_{LJ}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{C_1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^{13}} - \frac{C_2}{|\vec{r} - \vec{r}'|^6}$$

$$V(\vec{r}, \vec{r}') = g \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{tr}(\vec{r}) + g \cdot |\phi(\vec{r}, t)|^2 \right] \phi(\vec{r}, t)$$

$$V_{ww}(\vec{r}) = \langle V(\vec{r}, \vec{r}') \rangle = \langle \phi | V(\vec{r}, \vec{r}') | \phi \rangle$$

$$g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_m$$

3.1 BCS Theorie

- Bardeen, Cooper, Schrieffer (PR 108, 5, 1957)
- Paarbildung bei bel. kleinem attraktiven Potential
- WW durch Streuung der Fermionen
- Schwach gebunden mit Bindungslänge \gg mittl. Atomabstand
- Vielteilcheneffekt

Verwendete Formeln

$$[T_1 + T_2 + \lambda \cdot V(1,2)] \cdot \psi(1,2) = E\psi(1,2) \quad H = H_0 + \lambda \cdot V(1,2)$$

$$\psi(1,2) = \varphi_0(1,2) + \sum_{n \neq 0} \varphi_n(1,2) \frac{1}{E - E_n} \langle \varphi_n | \lambda \cdot V | \psi(1,2) \rangle$$

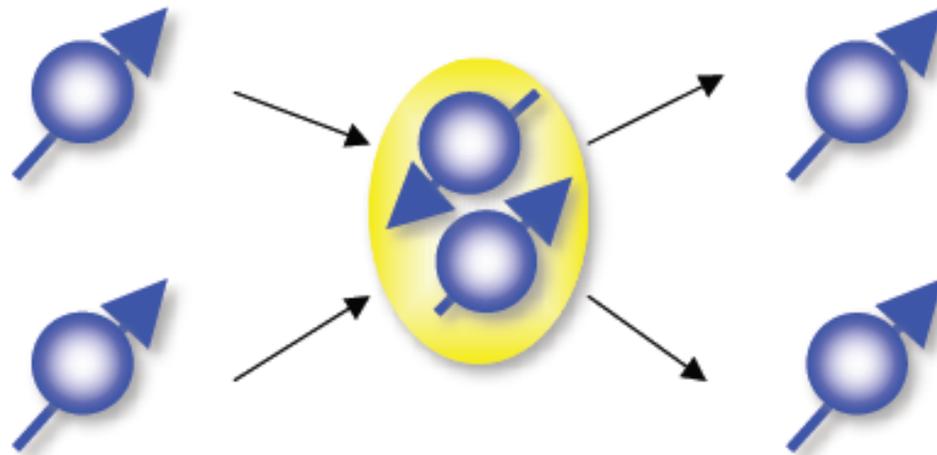
$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{V} \frac{|u(k)|^2}{\kappa^2 - k^2} + \int_{\Gamma} \frac{d^3 \xi}{(2\pi)^3} \frac{|u(\xi)|^2}{\kappa^2 - \xi^2} = f(\kappa^2)$$

$$\kappa^2 = k_F^2 - \frac{m\Delta}{\hbar^2}$$

$$\Delta = \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \cdot \exp \left[- \frac{4\pi^2}{k_F |\lambda| \cdot |u(k_F)|^2} \right]$$

4.1 Feshbach Resonanz

- Herman Feshbach (1958): Prozess, bei dem Schwerpunktsenergie einer Streuung gerade so groß ist wie die Energie eines gebundenen Molekülzustands der Stoßpartner



Hier: Atomarer Streuzustand (open channel) koppelt mit Molekülzustand (closed channel)

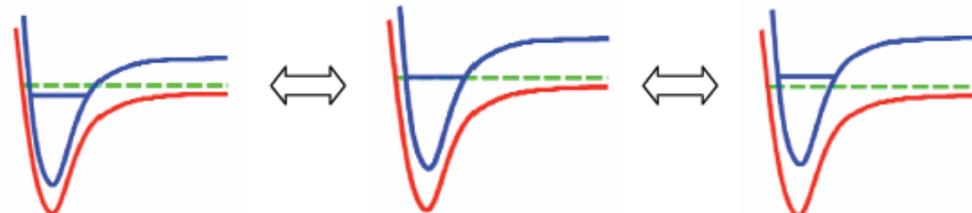
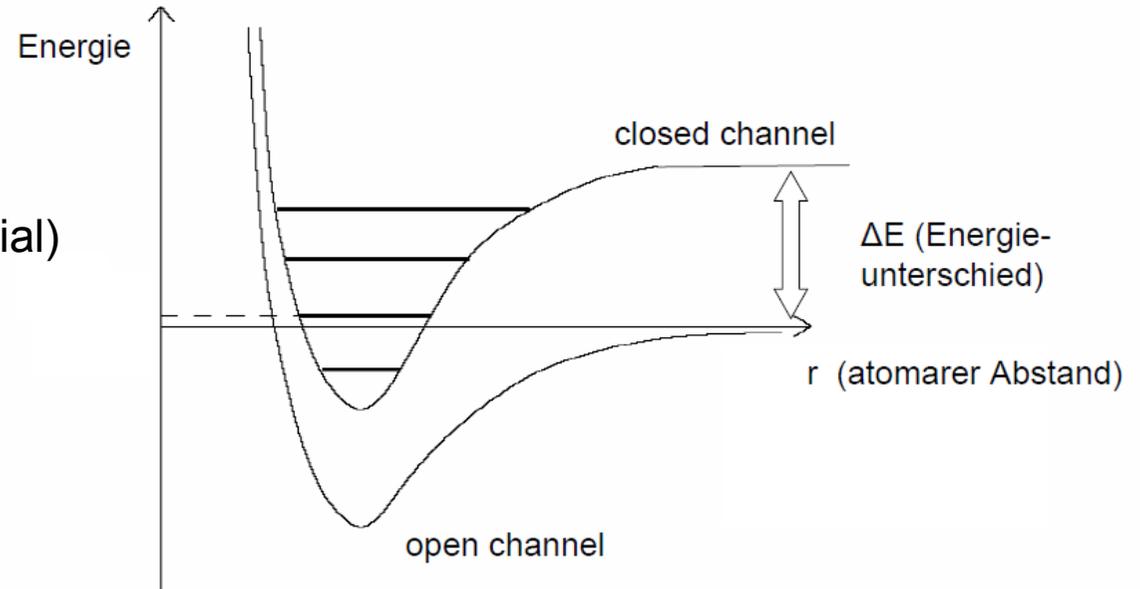
genauer

- Betrachte freie streuende Teilchen
- Zwei Potentiale:
open channel (Streupotential)
closed channel (Molekülpotential)
- Gilt:

$$E_{coll} = E_{BS}$$

Feshbach Resonanz

- Durch äuß. Magnetfeld und verschiedene magn. Momente:
- Verschiebung der Potentiale gegeneinander möglich
- Zeeman Shift: $\Delta\mu \cdot B$



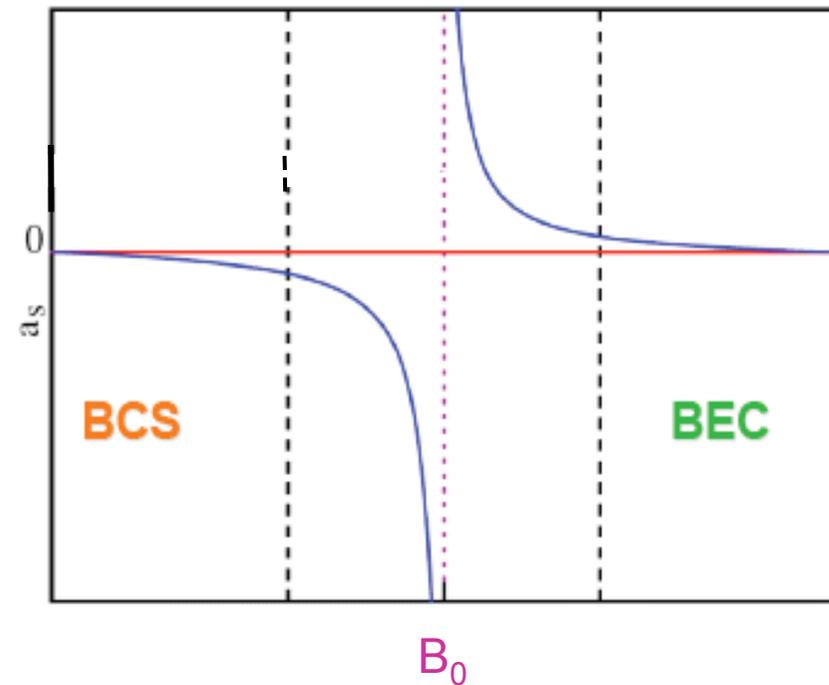
4.2 Streulänge

- B-Feld ändert Streulänge
- Quantenmech. Rechnung unter s-Wellenbed. führt auf:

$$a(B) = a_0 - \frac{C}{2\mu_{atom}(B_0) - \mu_{molekül}(B_0)} \cdot \frac{1}{B - B_0}$$

Divergenz bei $B=B_0$!!

Nutze $a(B)$ als Parameter zur Beschreibung des Crossovers



4.3 der Crossover

- Vielteilchentheorie und QFT liefert folgende Ergebnisse
- [siehe „Making, probing and understanding ultracold Fermi Gases“, Course CLXIV, Varenna, 20 - 30 June 2006 *Wolfgang Ketterle and Martin W. Zwierlein*]

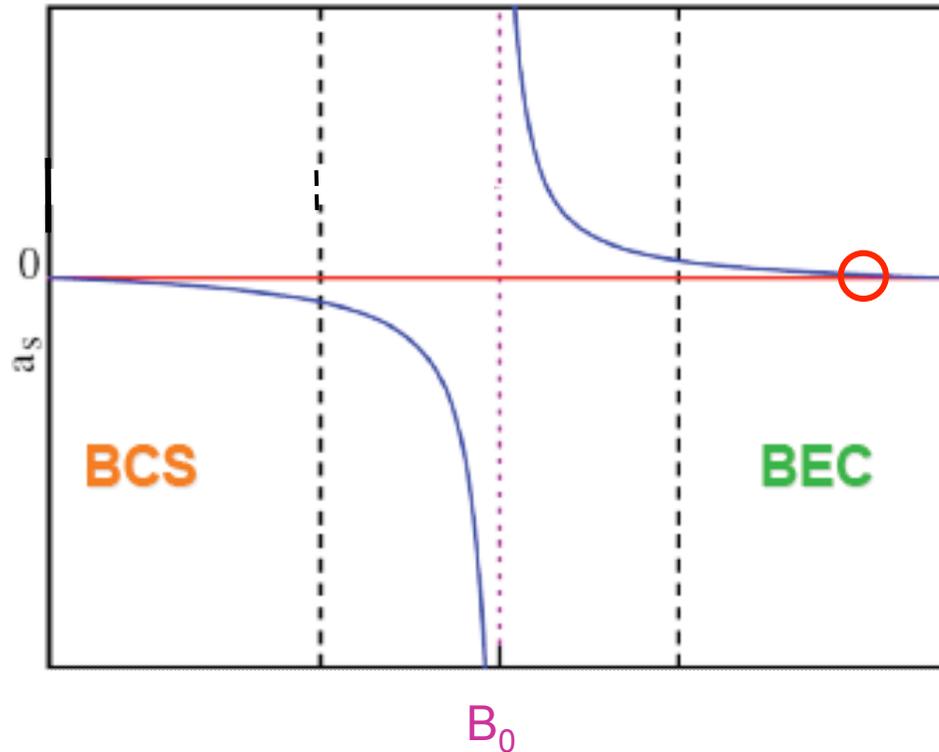
BEC Seite

$$\mu = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\pi\hbar^2 a}{m}n$$
$$\Delta \approx \sqrt{\frac{16}{3\pi}} \cdot \frac{E_F}{k_F a}$$

BCS Seite

$$\mu \approx E_F$$
$$\Delta \approx \frac{8}{e^2} \exp\left(\frac{-\pi}{2k_F |a|}\right)$$

BEC-Seite

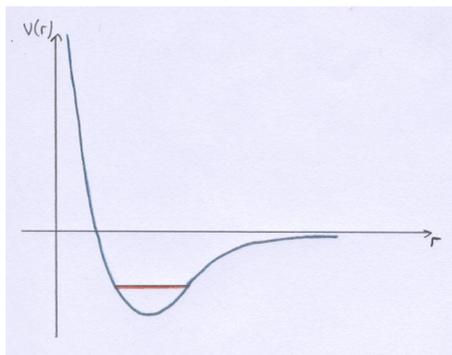


$a(B)$ klein
 $a(B) > 0$

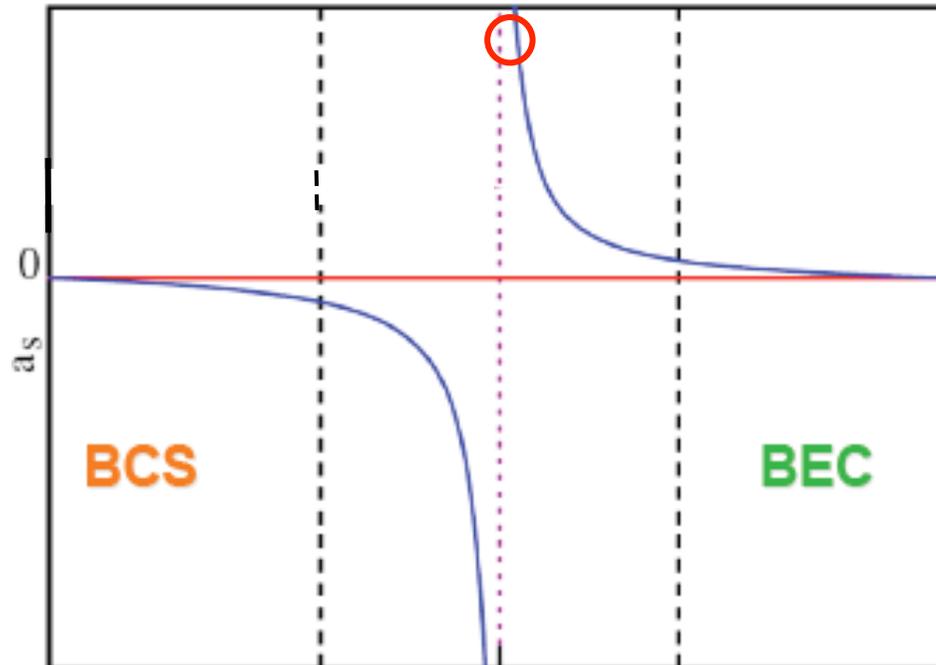
$$\mu = -\frac{\hbar^2}{2m(a(B))^2} + \frac{\pi\hbar^2 n}{m} a(B)$$

- Bindungsenergie groß
- kleine (nicht verschwindende) repulsive WW

→ Bose Einstein Kondensat aus stark gebundenen Molekülen



nahe der Resonanz

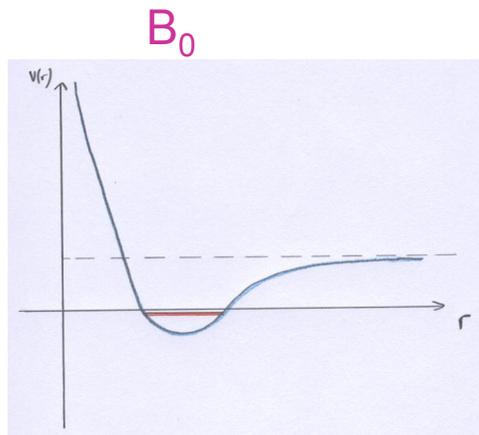


$$a(B) \gg 0$$

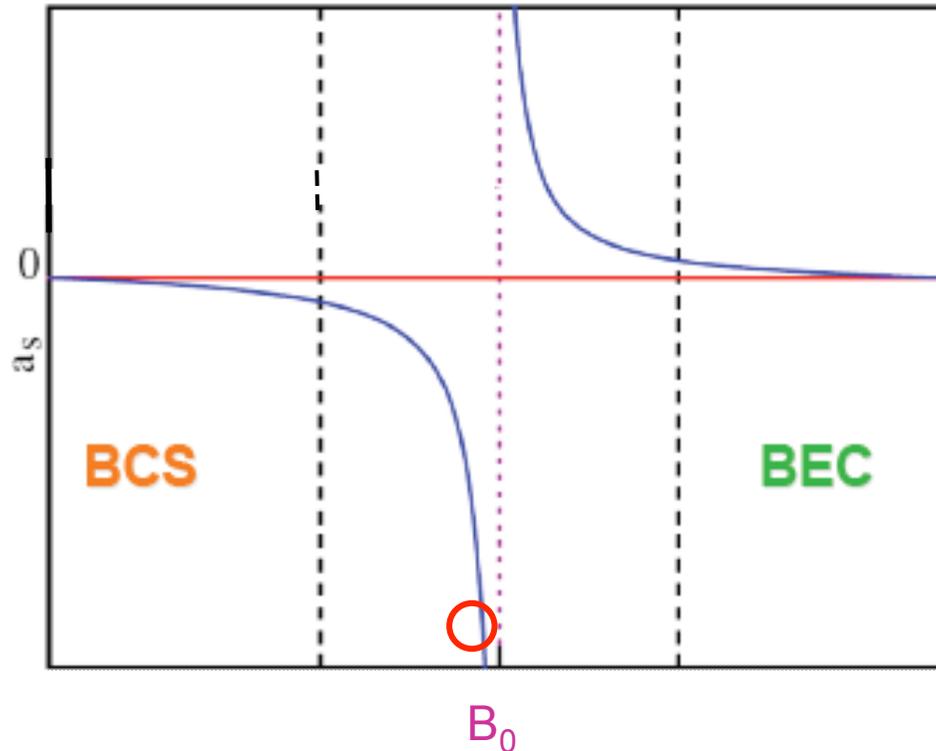
$$\mu = -\frac{\hbar^2}{2m(a(B))^2} + \frac{\pi\hbar^2 n}{m} a(B)$$

- Bindungsenergie gegen 0
- sehr große repulsive WW zwischen Molekülen

→ Für $B=B_0$:
Molekülbindung bricht auf;
Bindungsenergie
verschwindet aus chem. Pot.



über die Resonanz

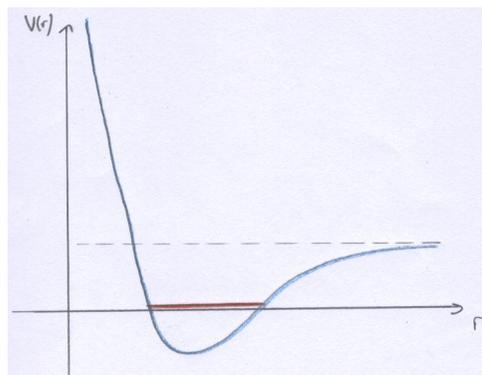


$a(B)$ wechselt Vorzeichen
 $a(B) \ll 0$

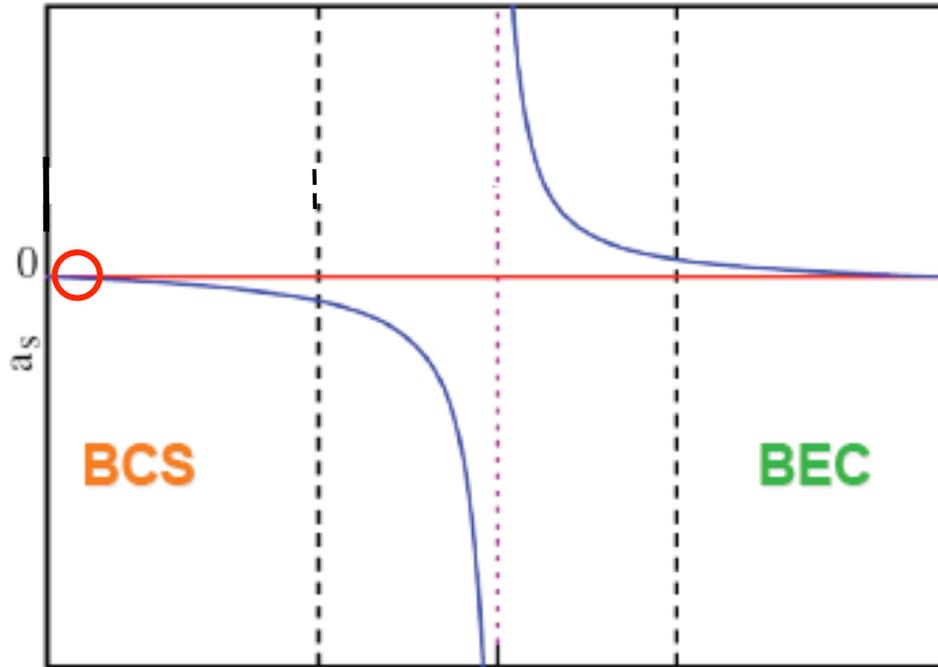
$$V_{ww} = \frac{\pi \hbar^2 n}{m} a(B)$$

- WW-Potential wird stark attraktiv
- Achtung: keine Moleküle mehr, sondern freie Fermionen

→ Freie Fermionen beginnen durch attraktive WW Cooper-Paare zu bilden (BCS Theorie)



BCS-Seite



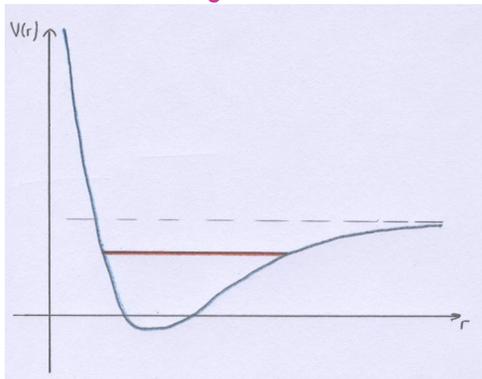
B_0

$$a(B) < 0$$

$$V_{ww} = \frac{\pi \hbar^2 n}{m} a(B)$$

- WW-Potential bleibt attraktiv
- Großteil der Fermionen liegt als Cooper Paare vor

→ Kondensat aus Cooper Paaren



Zusammenfassung

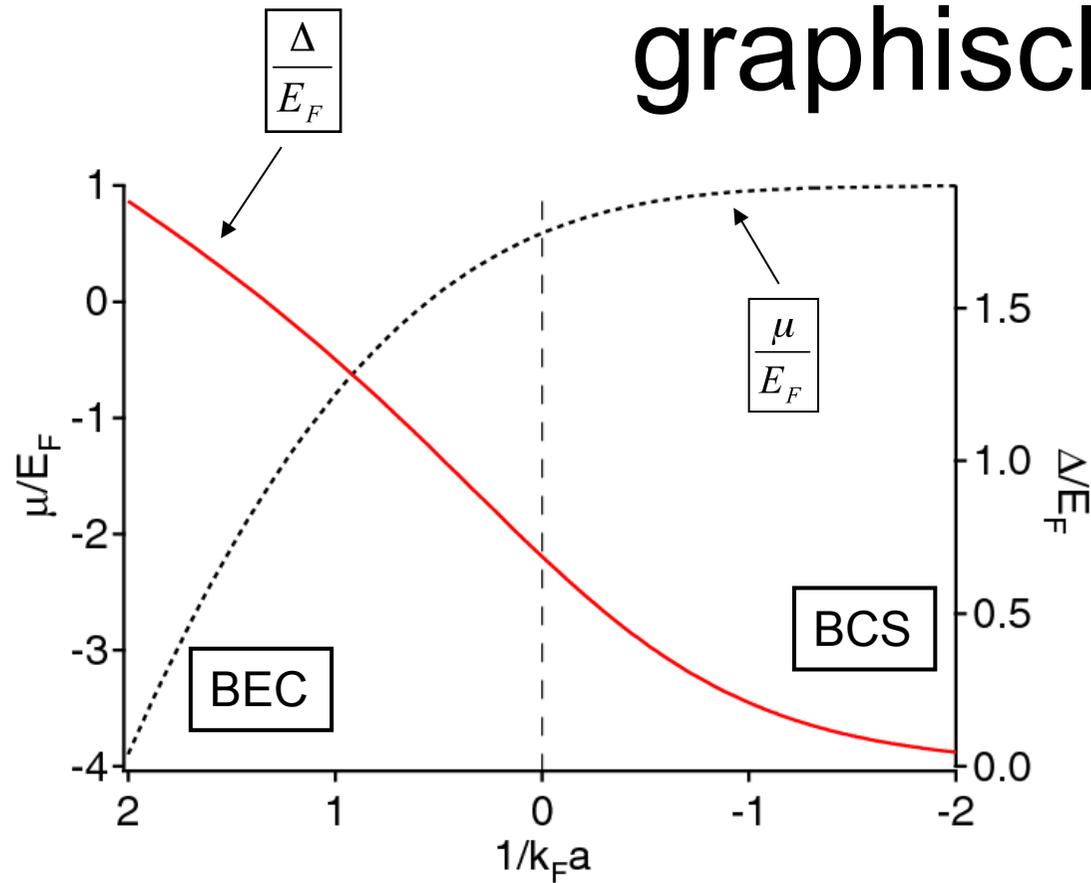
- Durch äußeres Magnetfeld lässt sich Streulänge und damit Kopplung der Fermionen beliebig ändern

- Mit

$$-\infty \leq \frac{1}{k_F a} \leq \infty$$

lässt sich gesamter Crossover „durchfahren“

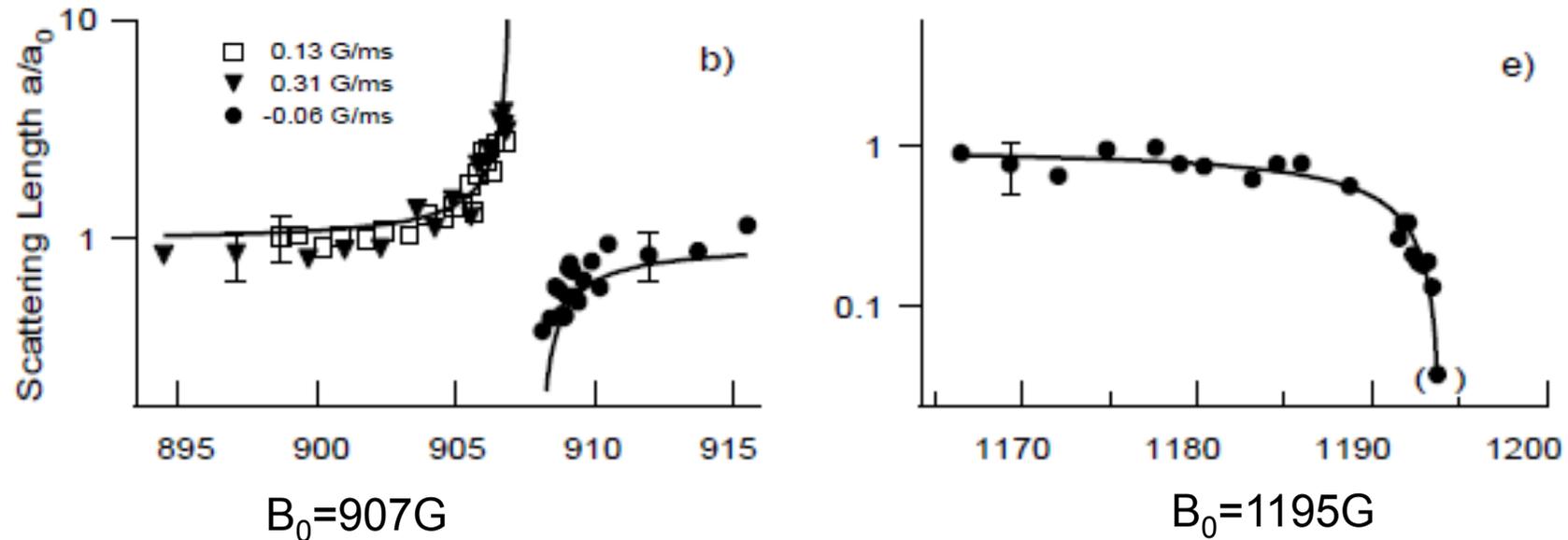
graphisch



chem. Potential und „energy gap“ in Abhängigkeit der inversen Streulänge

Betrachte den Crossover als Phasenübergang mit μ und Δ als Ordnungsparametern → glatter Phasenübergang mind. von Ordnung 2

5. experimentell



Relative Streulänge über Magnetfeld aufgetragen für BEC aus Natriumatomen

J. Stenger, S. Inouye, M. R. Andrews,* H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn,
and W. Ketterle ; Phys Rev. Lett. 82 ,12 (1998)

6. Historisches

- 1908: *Kamerlingh Onnes* He-4

- 1956: *Bardeen, Cooper, Schrieffer* BCS-Theorie für Supraleitung
- 1969: *Eagles* (Theorie: Kondensat aus Cooper Paaren)
- 1980: *Leggett, Nozières, Schmitt-Rink* (Theorie des Crossover)

- 1999: erstes entartetes Fermi-Gas (*Jin, Boulder*)
- 2003: erstes molekulares BEC (Boulder, Innsbruck, MIT etc.)
- 2004: erstes BCS Kondensat (*Jin, Boulder*)

7. Ausblick

Vergleichbare Systeme:

- Neutronensterne
- Quark-Gluon-Plasma
- Hochtemperatursupraleitung

Modelle basierend auf dem Crossover/atomaren Cooper Paaren könnten diese aktuellen Forschungsgebiete vorantreiben

Die Master-Gleichung

Seminarvortrag im Seminar über Probleme der statistischen Mechanik

Patrick Brem

13.11.2009

1 Stochastische Prozesse

1.1 Definition

Sei X Zufallsvariable verteilt mit der Wahrscheinlichkeitsfunktion $P_X(x)$ für die Realisierung x . Dann nennt man eine Funktion

$$Y_X(t) = f(X, t) \quad (1)$$

einen stochastischen Prozess. Für einen speziellen Wert x der Zufallsvariablen X erhält man eine normale Funktion

$$Y_x(t) = f(x, t) \quad (2)$$

die man als Realisierung bezeichnet. Der Erwartungswert von $Y(t)$ über alle Realisierungen ist wie gewohnt

$$\langle Y(t) \rangle = \int Y_x(t) P_X(x) dx \quad (3)$$

1.2 Hierarchie von Verteilungsfunktionen

Die Funktion $P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n)$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeit, dass zu den jeweiligen Zeitpunkten t_i die Variable Y den Wert y_i annimmt:

$$P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) = \int \delta(y_1 - Y_x(t_1)) \cdot \dots \cdot \delta(y_n - Y_x(t_n)) P_X(x) dx \quad (4)$$

Die Menge der Funktionen P_n nennt man *Hierarchie* und hat die folgenden Eigenschaften:

- $P_n \geq 0$
- P_n ist invariant unter Austausch zweier Wertepaare $(y_i, t_i), (y_j, t_j)$.

•

$$\int P_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) dy_n = P_{n-1}(y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}) \quad (5)$$

- $\int P_1(y_1, t_1) dy_1 = 1$

1.3 Bedingte Wahrscheinlichkeit

Zur Notation: $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass unter der Voraussetzung, dass Y zur Zeit t_1 den Wert y_1 angenommen hat, Y zur Zeit t_2 den Wert y_2 annimmt (also: von rechts nach links).

Allgemein gilt der *Satz von Bayes* in seiner anschaulichen Form:

$$P_k(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k) P_{l|k}(y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l} | y_1, t_1; \dots; y_k, t_k) = P_{k+l}(y_1, t_1; \dots; y_{k+l}, t_{k+l}) \quad (6)$$

Die Wahrscheinlichkeit für alle $k + l$ Wertepaare ist die Wahrscheinlichkeit für das Erreichen der ersten k Paare multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit, dass unter dieser Voraussetzung die anderen l Paare erreicht werden.

2 Markov-Prozesse

2.1 Definition

Ein stochastischer Prozess heißt Markov-Prozess, falls für jede mögliche Kombination von n Zeitpunkten mit $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ gilt:

$$P_{1|n-1}(y_n, t_n | y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}) = P_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}) \quad (7)$$

Die Funktion $P_{1|1}$ definiert dann eine *Übergangswahrscheinlichkeit* zwischen zwei Zuständen, die jeweils nur vom aktuellen Zustand abhängt. Deshalb lässt sich die komplette Hierarchie eines Markov-Prozesses durch die beiden Funktionen P_1 und $P_{1|1}$ erschließen.

2.2 Chapman-Kolmogorov-Gleichung

Beispielsweise lässt sich P_3 so bilden:

$$P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) \quad (8)$$

Integriert man nun über y_2 und nutzt Gl. (5) so erhält man

$$P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) \int P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2. \quad (9)$$

Teilen wir durch $P_1(y_1, t_1)$ und benutzen Gl. (6) so erhalten wir die *Chapman-Kolmogorov-Gleichung*:

$$P_{1|1}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int P_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2. \quad (10)$$

Anschaulich summiert man also, wenn man die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs zwischen t_1 und t_3 sucht, über alle möglichen Werte zu einer Zeit t_2 , die dazwischen liegt.

2.3 Stationäre Markov-Prozesse

Bei stationären Prozessen hängt P_1 nicht vom betrachteten Zeitpunkt t_1 ab und die Übergangswahrscheinlichkeiten nur von der Zeitdifferenz $\tau = t_2 - t_1$. Dies lässt eine einfachere Schreibweise für die Übergangswahrscheinlichkeiten zu:

$$T_\tau(y_2 | y_1) \equiv P_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) \quad (11)$$

T_τ ist die Übergangswahrscheinlichkeit von y_1 nach y_2 in der Zeitspanne τ . Gl. (10) lässt sich dann so schreiben:

$$T_{\tau+\tau'}(y_3 | y_1) = \int T_{\tau'}(y_3 | y_2) T_\tau(y_2 | y_1) dy_2 \quad (12)$$

3 Die Master-Gleichung

3.1 Herleitung aus der Chapman-Kolmogorov-Gleichung

Nun betrachtet man die Chapman-Kolmogorov-Gleichung für infinitesimale Zeiten $\tau \rightarrow 0$. Man erhält den folgenden Ausdruck, wenn man T_τ in einer Taylor-Reihe entwickelt:

$$T_\tau(y_2|y_1) = (1 - a_0(y_1)\tau)\delta(y_2 - y_1) + \tau W(y_2|y_1) + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (13)$$

Der Faktor $(1 - a_0(y_1)\tau)$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit für keinen Übergang, d.h. a_0 ist die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit, dass irgendein Übergang stattfindet.

$$a_0(y_1) = \int W(y|y_1)dy \quad (14)$$

Analog ist $W(y_2|y_1)$ die Wahrscheinlichkeit pro Zeit für den betrachteten Übergang. In erster Näherung ist die gesamte Wahrscheinlichkeit proportional zur Intervallgröße τ . Diesen Ausdruck setzt man nun in Gl. (12) für $T_{\tau'}$ ein und erhält

$$T_{\tau+\tau'}(y_3|y_1) = (1 - a_0(y_3)\tau')T_\tau(y_3|y_1) + \tau' \int W(y_3|y_2)T_\tau(y_2|y_1)dy_2. \quad (15)$$

Teilt man durch τ' und führt den Grenzübergang $\tau' \rightarrow 0$ durch erhält man auf der linken Seite den Differenzenquotienten für $T_\tau(y_3|y_1)$

$$\frac{\partial T_\tau(y_3|y_1)}{\partial \tau} = \int (W(y_3|y_2)T_\tau(y_2|y_1) - W(y_2|y_3)T_\tau(y_3|y_1))dy_2. \quad (16)$$

Dies ist die Master-Gleichung. Bezeichnet man $T_\tau(y_2|y_1) = P(y_2, \tau)$ und nennt noch die y um ergibt sich die bekannte Form:

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int (W(y|y')P(y', t) - W(y'|y)P(y, t))dy' \quad (17)$$

Für diskrete Zustände $y_n \equiv n$ erhält man die Summenform

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = \sum_{n'} (W_{nn'}p_{n'}(t) - W_{n'n}p_n(t)). \quad (18)$$

Die Master-Gleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeit eines Zustands als Summe aus Ab- und Zuflüssen von anderen Zuständen.

3.2 Lösung der Mastergleichung

3.2.1 W-Matrizen

Definiert man die Matrix

$$\mathbb{W}_{nm} = W_{nm} - \delta_{nm} \left(\sum_k W_{kn} \right) \quad (19)$$

lässt sich die Mastergleichung in diskreten Zuständen auch als

$$\frac{d}{dt}p(t) = \mathbb{W}p(t) \quad (20)$$

schreiben, wenn $p(t)$ der Vektor aller n Zustände ist. Zwei Eigenschaften solcher \mathbb{W} -Matrizen sind:

- $\mathbb{W}_{nm} \geq 0 \quad \forall n \neq m$
- $\sum_n \mathbb{W}_{nm} = 0 \quad \forall m$

Da an \mathbb{W} außer diesen beiden Eigenschaften keine Anforderungen gestellt werden können (wie Symmetrie, Tridiagonalform etc.), ist die Lösung dieses Eigenwertproblems im Allgemeinen nicht leicht. An der zweiten Eigenschaft sieht man jedoch, dass \mathbb{W} einen linken Eigenvektor $(1, 1, \dots, 1)$ mit Eigenwert 0 hat. Daraus folgt, dass es auch immer einen rechten Eigenvektor Φ mit Eigenwert 0 geben muss, also immer eine stationäre Lösung.

$$\mathbb{W}\Phi = 0 \quad (21)$$

3.2.2 Reduzierbarkeit

Falls man durch Umordnung der Zustände die Matrix \mathbb{W} auf die Form

$$\begin{pmatrix} \mathbb{A} & 0 \\ 0 & \mathbb{B} \end{pmatrix} \quad (22)$$

bringen kann, wobei \mathbb{A} und \mathbb{B} quadratisch sind und selbst den Eigenschaften der \mathbb{W} -Matrizen genügen, nennt man \mathbb{W} vollständig reduzierbar. Es gibt dann zwei orthogonale Lösungen mit Eigenwert 0, nämlich

$$\begin{pmatrix} \Phi_A \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ \Phi_B \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Dies entspricht zwei Subsystemen zwischen denen keine Übergänge möglich sind.

Lässt sich lediglich die Form

$$\begin{pmatrix} \mathbb{A} & \mathbb{D} \\ 0 & \mathbb{B} \end{pmatrix} \quad (24)$$

erreichen, worin sowohl \mathbb{B} als auch \mathbb{D} keine \mathbb{W} -Matrizen mehr sind, nennt man \mathbb{W} (unvollständig) reduzierbar. Die Lösung

$$\begin{pmatrix} \Phi_A \\ 0 \end{pmatrix} \quad (25)$$

gibt es weiterhin. Für Zustände, die dem nicht abgeschlossenen System B zugeordnet werden können, gilt jedoch

$$\frac{d}{dt}p_b = \sum_{b'} \mathbb{B}_{bb'} p_{b'} \quad (26)$$

und für die gesamte Wahrscheinlichkeit für die Besetzung eines Zustandes außerhalb von A folgt

$$\frac{d}{dt} \sum_b p_b = \sum_b \left(\sum_{b'} \mathbb{B}_{bb'} p_{b'} \right) = \sum_{b'} \left(\sum_b \mathbb{B}_{bb'} \right) p_{b'} = - \sum_{b'} \left(\sum_a \mathbb{D}_{ab'} \right) p_{b'}. \quad (27)$$

Das heißt die Zustände in B verlieren an das System A über die Übergangswahrscheinlichkeiten in \mathbb{D} . Der einzige Gleichgewichtszustand ist hier also der Eigenzustand zu \mathbb{A} .

3.3 Detailliertes Gleichgewicht

Für ein abgeschlossenes, isoliertes System gilt unter den folgenden Voraussetzungen sogenanntes *detailliertes Gleichgewicht*:

- Die Hamiltonfunktion ist eine gerade Funktion in den Impulsen.
- Die betrachtete Zustandsgröße ist eine gerade Funktion in den Impulsen.

Daraus folgt *Invarianz unter Zeitumkehr*, d.h. nach der Koordinatentransformation

$$\bar{t} = -t \quad \bar{q} = q \quad \bar{p} = -p \quad (28)$$

sehen die kanonischen Bewegungsgleichungen in den gestrichelten Koordinaten gleich aus. Fassen wir q und p im Vektor x zusammen und meinen mit x^τ den Wert von x nach einer Zeit τ ergeben sich folgende Identitäten:

$$(x^\tau)^\tau = \bar{x} \quad \bar{x}^\tau = x^{-\tau} \quad Y_{\bar{x}}(t) = Y_x(-t) \quad (29)$$

Im Gleichgewicht soll außerdem die Gleichgewichtsverteilung $p_x^e(x)$ invariant unter der obigen Transformation sein. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} P_2(y_1, 0; y_2, \tau) &= \int \delta(y_1 - Y_x(0)) \delta(y_2 - Y_x(\tau)) p_x^e(x) dx \\ &= \int \delta(y_1 - Y_{\bar{x}}(0)) \delta(y_2 - Y_{\bar{x}}(\tau)) p_{\bar{x}}^e(\bar{x}) d\bar{x} \\ &= \int \delta(y_1 - Y_x(0)) \delta(y_2 - Y_x(-\tau)) p_x^e(x) dx \\ &= P_2(y_1, 0; y_2, -\tau) = P_2(y_1, \tau; y_2, 0) \end{aligned}$$

Mit dem Satz von Bayes und für stationäre Markov-Prozesse lässt sich dies als

$$T_\tau(y_2|y_1) p^e(y_1) = T_\tau(y_1|y_2) p^e(y_2) \quad (30)$$

schreiben. Dies nennt man *detailliertes Gleichgewicht*. Für Systeme unter den obigen Voraussetzungen verschwindet also im Gleichgewicht jeder Summand in der Mastergleichung einzeln.

3.4 Das H-Theorem

Über eine beliebige Funktion $f(x)$ mit den Eigenschaften

$$0 \leq x < \infty \quad f(x) \geq 0 \quad f''(x) > 0 \quad (31)$$

definiert man eine Funktion

$$H(t) = \sum_n p_n^e f\left(\frac{p_n(t)}{p_n^e}\right) \quad x_n = \frac{p_n(t)}{p_n^e}. \quad (32)$$

Man betrachtet nun die zeitliche Ableitung:

$$\begin{aligned} \frac{dH(t)}{dt} &= \sum_{nn'} f'(x_n)(W_{nn'}p_{n'} - W_{n'n}p_n) \\ &= \sum_{nn'} W_{nn'}p_n^e(x_{n'}f'(x_n) - x_n f'(x_{n'})) \end{aligned}$$

Aus detailliertem Gleichgewicht folgt, dass die folgende Summe für beliebige Zahlen α_n verschwindet

$$\sum_{nn'} W_{nn'}p_{n'}^e(\alpha_n - \alpha_{n'}) = 0. \quad (33)$$

Wählt man $\alpha_n = f(x_n) - x_n f'(x_n)$ und addiert dies dazu, so erhält man

$$\frac{dH(t)}{dt} = \sum_{nn'} W_{nn'}p_{n'}^e((x_{n'} - x_n)f'(x_n) + f(x_n) - f(x_{n'})). \quad (34)$$

Aus der Konvexität von f folgt, dass der Ausdruck in der Klammer immer kleiner gleich Null ist. Gleichheit gilt nur für $x_n = x_{n'}$. Da aber $H(t) \geq 0$, muss sich H im Gleichgewicht auf 0 einstellen.

Wenn man $f(x) = x \log(x)$ wählt, dann kann man das entsprechende H mit der Entropie S identifizieren:

$$S = -k_b H + S_0 \quad (35)$$

S_0 ist die Entropie im thermodynamischen Gleichgewicht. Das H-Theorem sagt dann also aus, dass sich S nur Erhöhen kann (im abgeschlossenen, isolierten System) und im Gleichgewicht maximal ist mit $S = S_0$.

3.5 Realisierung des Ising-Modells mit Markov-Chain-Monte-Carlo-Methoden

Als Anwendung eines Markov-Prozesses, der detailliertes Gleichgewicht erfüllt, betrachte man ein zweidimensionales Spingitter von $N \times N$ Gitterplätzen mit periodischen Randbedingungen ohne äußeres Feld. Im Ising-Modell beschränkt sich die Wechselwirkung der Spins auf die jeweils nächsten vier Nachbarn. Der Hamiltonian ist

$$H(\vec{S}) = -J \sum_{n.N.} S_i S_j \quad (36)$$

mit $S_i = \pm 1$. Die Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeitschritt konstruiert man nach dem MRRTT-Proposal-Acceptance-Algorithmus¹

$$W(\vec{S}, \vec{S}') = \underbrace{\gamma \Theta(\delta - |\vec{S} - \vec{S}'|)}_{\text{proposal}} \underbrace{\min(1, \frac{p(\vec{S})}{p(\vec{S}')})}_{\text{acceptance}} \quad (37)$$

Hierbei beschränkt die Θ -Funktion den Abstand $|\vec{S} - \vec{S}'|$ zweier Konfigurationen auf δ . Hier heißt das, dass man sich pro Zeitschritt nur einen einzelnen Spin anschaut. Mit der Wahrscheinlichkeit $\gamma = 0.5$ schlägt man einen Spinflip vor bzw. belässt die Spineinstellung. Falls ein Spinflip vorgeschlagen wird, berechnet man die Wahrscheinlichkeit, diesen zu akzeptieren mit dem thermischen Boltzmannfaktor

$$\frac{p(\vec{S})}{p(\vec{S}')} = \exp(-\beta \Delta E). \quad (38)$$

Energetisch günstigere Konfigurationen werden immer akzeptiert. Durch variieren der Temperatur erhält man so Spingleichrichtung für kleine Temperaturen und weitgehende Auflösung der Ordnung für höhere Temperaturen (vgl. Abb. (1)).

¹Benannt nach Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller und Teller (jeweils Ehepaare)

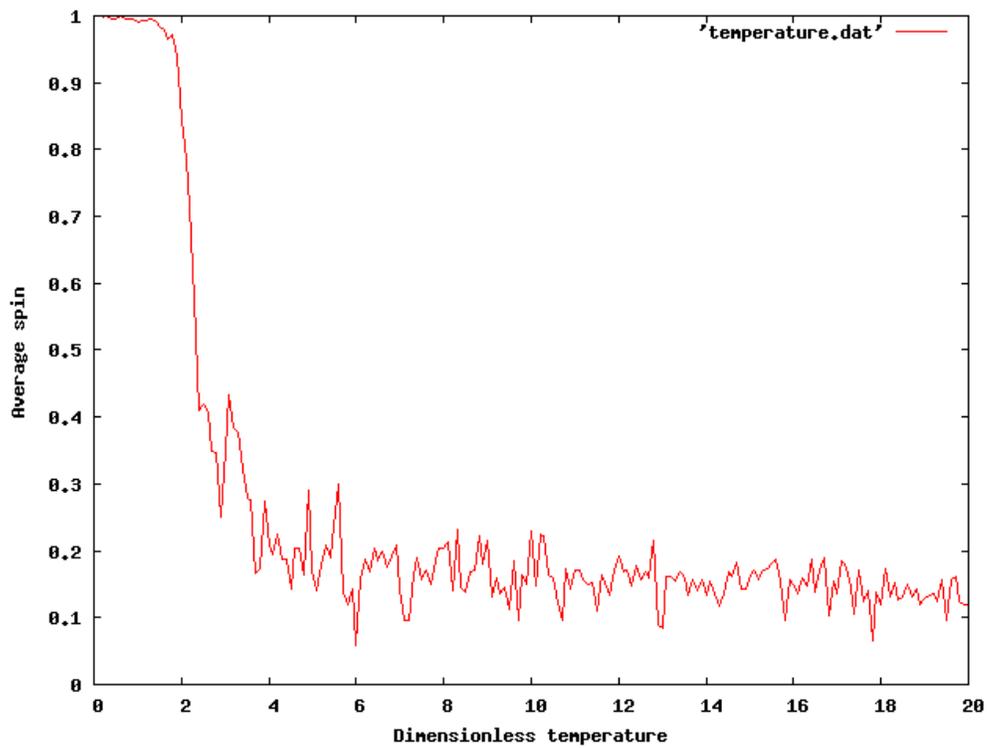


Abbildung 1: Abhängigkeit der Spinordnung von der Temperatur

4 Quellen

- Stochastic Processes in Physics and Chemistry, N.G. van Kampen, North Holland, 1984
- „Über das H-Theorem vom Anwachsen der Entropie vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik“, W. Pauli jr., 1928
- Skript zur Vorlesung „Introduction to Computational Physics“, R. Kühn, R. Spurzem, Uni Heidelberg, 2008

Langevin Equation and Fokker-Planck-Equation¹

Introduction

Systems with noise and fluctuations are common in physics. Examples include: Brownian motion, order parameter at phase transitions, thermal noise in electrical circuits, dielectric relaxations and many other. A lot of examples can also be found in biology and economy.

There are two natural approaches to describing such systems:

1. Suppose we are interested in some observable $V(t)$. One thing we could do, is to set a *stochastic differential equation* of motion for $V(t)$. In general, we will have something like:

$$\frac{d}{dt}V(t) = A(V, t) + B(V, t)\eta(t) \quad (1)$$

with $A(V, t)$ and $B(V, t)$ being some deterministic functions and $\eta(t)$ a stochastic process, representing the noise.

This approach is known as the Langevin approach and the stochastic differential equation as a Langevin equation

2. The second possibility is not to work directly with the observable $V(t)$, but rather with its *probability distribution* $P(V, t)$. We can then try to set up an equation of motion for the distribution. In general, will we have something of the form:

$$\partial_t P(V, t) = \Lambda P(V, t) \quad (2)$$

where Λ will be some operator including differentiation and integration of $P(V, t)$. Examples of such equations are the Master equation and Fokker-Planck equation.

Here we will deal with the Langevin and Fokker-Planck equations.

¹This is a short recap of a talk given on 20.11.2009 at a statistics seminar at the University of Heidelberg. This work is *not* meant as a substitute for the talk itself. Some examples, derivation steps and discussions are hence missing.

The Langevin approach

In 1907 Langevin wrote the prototype of a stochastic differential equation in his work on Brownian motion.

$$m \frac{d}{dt} \bar{v}(t) = -m\kappa \bar{v}(t) + \bar{f}(t) \quad (3)$$

This equation is nothing more than Newton's second law with a friction term $-m\kappa \bar{v}(t)$ and a fluctuating force $\bar{f}(t)$. For different physical systems one can find equations, which are essentially the same. For example:

$$L \frac{d}{dt} I(t) = -RI(t) + \nu(t) \quad (4)$$

$$\frac{d}{dt} Q(t) = -\frac{Q(t)}{RC} + L(t) \quad (5)$$

Equation (4) can be used to describe the thermal noise in an electrical resistor and (5) the charge on the capacitor in a RC-circuit. There are, of course, many other examples.

To stress the generality of the methods, I will work with the equation

$$\frac{d}{dt} V(t) = -aV(t) + b\eta(t) \quad (6)$$

where $V(t)$ is some observable we are interested in, $\eta(t)$ is the stochastic process, causing the fluctuations, and a, b are constants dependent on the concrete physical situation. Equation (6) is the linear Langevin equation.

A straight forward solution of (6) gives:

$$V(t) = V_0 e^{-at} + b e^{-at} \int_0^t dt' e^{at'} \eta(t') \quad (7)$$

It is now important to remember that $\eta(t)$ is a *stochastic process*, so the only meaningful thing is to talk about averages $\langle \dots \rangle$ over ensembles. Central to the Langevin approach are the following *assumptions* about the noise term:

1. $\langle \eta(t) \rangle = 0$, i.e. the noise is totally random and does not cause a drift in any particular direction.
2. $\langle V(t') \eta(t) \rangle = 0$, which means that $\eta(t)$ is independent of $V(t')$ for $t > t'$
3. $\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t')$ i.e. the noise at different times t and t' is not correlated. This assumption is reasonable only when we are interested in the behavior of the system at time scales, which are much larger than the single fluctuations.
4. $\eta(t)$ takes its values from a Gaussian distribution. This assumption is necessary because, in general, the specification of the first and second moments in 1. and 3. doesn't uniquely determine the distribution of $\eta(t)$.

A noise term satisfying 1. - 4. is *Gaussian white noise* and is sometimes called a “Langevin force”. These assumptions are central to the Langevin approach and are always to be assumed, when talking about Langevin equations.

We can now go back to our solution (7) and using the assumptions above obtain:

$$\langle V(t) \rangle = V_0 e^{-at} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \langle V^2(t) \rangle &= V_0^2 e^{-2at} + b^2 e^{-2at} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' e^{(t'+t'')a} \langle \eta(t') \eta(t'') \rangle = \\ &= V_0^2 e^{-2at} + \frac{b^2 \Gamma}{2a} (1 - e^{-2at}) \end{aligned} \quad (9)$$

From equation (8) and (9) we see:

- for $t \gg \frac{1}{a}$ the mean and the second moment are independent of the initial condition V_0 . We can hence interpret $\frac{1}{a}$ as the relaxation time of the system.
- for $a < 0$ both the mean and the second moment will grow exponentially and we will not get a stationary state.
- when $a > 0$ and $t \gg \frac{1}{a}$ we get:

$$\langle V(t) \rangle = 0 \quad (10)$$

$$\langle V^2(t) \rangle = \frac{b^2 \Gamma}{2a} \quad (11)$$

Since $\eta(t)$ was assumed Gaussian, $V(t)$ will also be normally distributed and, after relaxation, the mean will be 0 and the variance $\frac{b^2 \Gamma}{2a}$.

Example

We can now go back to the original Langevin equation (3) and rewrite it in the form:

$$\frac{d}{dt} \bar{v}(t) = -\kappa \bar{v}(t) + \frac{1}{m} \bar{f}(t)$$

Using the solutions above, for $t \gg \frac{1}{\kappa}$, we get $\langle \bar{v}^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2m^2 \kappa}$. For $t \gg \frac{1}{\kappa}$ we also expect the Brownian particle to relax in a thermally distributed state, where equipartition holds: $\frac{m \langle \bar{v}^2 \rangle}{2} = \frac{3}{2} k_B T$. Plugging in the expression for $\langle \bar{v}^2 \rangle$ gives:

$$\Gamma = 6\kappa m k_B T$$

This is known as the Einstein-relation. It is the simplest form of the fluctuation-dissipation theorem, linking the friction (dissipation) coefficient κ with the fluctuations coefficient Γ .

We can make a short summary of the Langevin approach. Suppose we have some system with fluctuations, which we can assume as Gaussian white noise. In describing it we can proceed as follows:

1. write down the macroscopic deterministic equation of motion
2. add a Langevin force $\eta(t)$ to the deterministic equation
3. adjust Γ until the stationary state reproduces the observed mean square fluctuations.

Note that the fluctuations don't need to be thermal and a Langevin force can be added even when the cause of the noise is unknown (but can be justified as Gaussian white noise!).

The Fokker-Planck-Equation

Now, instead of using the observable itself, we will start with its probability distribution $P(V, t)$. As long as the fluctuations can be assumed as a Markov process, we can write the Master equation for the system:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(V, t) = \int dV' [W(V|V')P(V', t) - W(V'|V)P(V, t)] \quad (12)$$

Equation (12) has the disadvantage that the time evolution of $P(V, t)$ is governed by all states V' and hence all transition probabilities $W(V|V')$. In practical terms these are difficult or impossible to find. The basic idea behind the Fokker-Planck-equation (FPE) is to assume that the time evolution of $P(V, t)$ is influenced only by states V' , which are close to V , i.e. we assume “*small steps*” in the transitions. Let us first write the Master equation in terms of the “step size”.

Define: $W(V + r|V) =: w(V, r)$. We can now rewrite (12):

$$\frac{\partial}{\partial t} P(V, t) = \int dr [w(V - r, r)P(V - r, t) - w(V, r)P(V, t)] \quad (13)$$

Assumptions for “small steps” in mathematical terms:

1. $w(V, r) \approx 0$ for $|r| > \varepsilon$
2. $w(V + \Delta V, r) \approx w(V, r)$ for $|\Delta V| < \varepsilon$

Now we can make a Taylor expansion of $w(V - r, r)P(V - r, t)$ around V :

$$w(V - r, r)P(V - r, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-r)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} w(V, r)P(V, t) \quad (14)$$

For the Master equation we get:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(V, t) &= \int dr \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{(-r)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} - 1 \right] w(V, r) P(V, t) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial V^n} \alpha_n(V) P(V, t)\end{aligned}\quad (15)$$

with

$$\alpha_n(V) := \int dr r^n w(V, r)$$

Equation (15) is known as the *Kramers-Moyal expansion*. To get to the Fokker-Planck-equation we have to further assume that the solutions $P(V, t)$, we are interested in, vary slowly with V .² Thus, we can take only terms up to second order and obtain:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(V, t) = -\frac{\partial}{\partial V}\alpha_1(V)P(V, t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial V^2}\alpha_2(V)P(V, t)\quad (16)$$

This is the general Fokker-Planck equation.

To understand its properties and advantages we must take a closer look at $\alpha_1(V)$ and $\alpha_2(V)$:

$$\begin{aligned}\alpha_1(V) &= \int dr r w(V, r) = \int dV' (V' - V) W(V'|V) = \int dV' (V' - V) \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} P_{1|1}(V', t + \Delta t | V, t) = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int dV' (V' - V) P_{1|1}(V', t + \Delta t | V, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta V \rangle_V}{\Delta t}\end{aligned}\quad (17)$$

Similarly one obtains:

$$\alpha_2(V) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta V)^2 \rangle_V}{\Delta t}\quad (18)$$

We can now make some important remarks:

- for the FPE we don't need all transition probabilities $W(V'|V)$ but just the functions $\alpha_1(V)$ and $\alpha_2(V)$, which we can obtain from finding $\langle \Delta V \rangle_V$ and $\langle (\Delta V)^2 \rangle_V$ for small times Δt . Plugging these in the FPE will give us the long time behavior of the system.
- the FPE is a partial differential equation and although not generally solvable, it is easier to handle than the integral-differential Master equation
- the first term on the right hand side of the FPE can be identified as a *drift term* and the second one as a *dissipation term*.

²Allowing only terms up to second order can also be justified by the Pawula theorem, without making any further assumptions

The connection between Langevin and FPE

We will now find the FPE corresponding to the linear Langevin equation (6) and show that it gives the same results.

We can rewrite equation (6) in the form:

$$\begin{aligned}\Delta V &= -aV\Delta t + b \int_t^{t+\Delta t} dt' \eta(t') \\ \Rightarrow \langle \Delta V \rangle &= -aV\Delta t + b \int_t^{t+\Delta t} dt' \langle f(t') \rangle = -aV\Delta t \\ \Rightarrow \alpha_1(V) &= -aV\end{aligned}\tag{19}$$

Similarly, by averaging and dropping terms of order Δt^2 , one finds:

$$\alpha_2(V) = b^2\Gamma\tag{20}$$

Plugging (19) and (20) in the general FPE gives:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(V, t) = a\frac{\partial}{\partial V}VP(V, t) + \frac{b^2\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial V^2}P(V, t)\tag{21}$$

This is the linear FPE *corresponding to the Langevin equation (6)*. To see that it gives the same results as obtained in (8) and (9), we have to solve (21). The idea of the solution is to transform the variables V and t , in order to get the familiar heat equation, whose solution we know.

Define the new variable $\nu = Ve^{at}$ and set $Y(\nu, t) := P(Ve^{-at}, t)$. This transforms equation (21) into:

$$\frac{\partial}{\partial \nu}Y(\nu, t) = aY(\nu, t) + \frac{b^2\Gamma}{2}e^{2at}\frac{\partial^2}{\partial \nu^2}Y(\nu, t)\tag{22}$$

Setting $Z(\nu, t)e^{at} = Y(\nu, t)$, further transforms (22) into:

$$\frac{\partial}{\partial t}Z(\nu, t) = \frac{b^2\Gamma}{2}e^{2at}\frac{\partial^2}{\partial \nu^2}Z(\nu, t)\tag{23}$$

With the new time variable $d\tau = e^{2at}dt$ and $\tau = \frac{1}{2a}(e^{2at} - 1)$ we obtain the heat equation:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}Z(\nu, \tau) = \frac{b^2\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial \nu^2}Z(\nu, \tau)\tag{24}$$

with the known solution:

$$Z(\nu, \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi b^2\Gamma\tau}}e^{-\frac{(\nu-\nu_0)^2}{2b^2\Gamma\tau}}\tag{25}$$

By substituting back the old variables we obtain for the distribution:

$$P(V, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi \frac{b^2 \Gamma}{a} (1 - e^{-2at})}} \exp\left\{-\frac{(V - V_0 e^{-at})^2}{\frac{b^2 \Gamma}{a} (1 - e^{-2at})}\right\} \quad (26)$$

From the solution above we clearly see that $P(V, t)$ is a Gaussian distribution with mean $\langle V(t) \rangle = V_0 e^{-at}$ and variance $\sigma^2 = \frac{b^2 \Gamma}{2a} (1 - e^{-2at})$. From this we obtain the second moment

$$\langle V^2(t) \rangle = \sigma^2 + \langle V(t) \rangle^2 = V_0^2 e^{-2at} + \frac{b^2 \Gamma}{2a} (1 - e^{-2at})$$

These are exactly the same solutions (8),(9) as in the Langevin approach.

Conclusion and further reading

We have shown that, for the linear case, the Langevin equation and the Fokker-Planck equation give the same results. These linear equations are applicable in a wide range of physical systems. Furthermore, some more complicated non-linear cases can be reduced to linear ones.

Some useful further reading includes:

- “*Statistische Mechanik*”, Schwabl - for an introductory discussion of the applications in critical dynamics, chemical reactions and super-symmetric quantum mechanics.
- “*Stochastic Processes in Physics and Chemistry*”, Van Kampen - for further details concerning non-linear equations, discussion of non-Gaussian- and “colored”-noise.
- “*The Langevin equation with applications in physics, chemistry and electrical engineering*” W.T. Coffey et alii. - for direct applications of the Langevin approach.
- “*The Fokker-Planck equation, Methods of solution and applications*”, H.Risken - for direct applications of the Fokker-Planck equation.

Please report errors, write critique or ask questions at: R.Doganov@stud.uni-heidelberg.de

Ising Modell

Sebastian Erne

Matrikelnummer: 2610389

27. November 2009



Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg
Seminar: Statistische Physik

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Aufbau des Seminarvortrags	1
1.2	Historisches	1
2	Onsager-Kaufman Lösung des Ising Modells	2
2.1	Grundlagen	2
2.2	Das 1-dimensionale Ising-Modell	2
2.3	Das 2-dimensionale Ising-Modell	5
2.3.1	Topologie und Zustandssumme	5
2.3.2	Die Zustandssumme	7
2.3.3	Die thermodynamischen Funktionen	7
2.3.4	Zusammenfassung und Ausblick	9

1 Einleitung

1.1 Aufbau des Seminarvortrags

Thema dieses Seminarvortrages ist das Ising-Modell. Besonderes Augenmerk wird hierbei auf die Beschreibung des Ferromagnetismus mittels des Ising-Modells gelegt. Nach einer allgemeinen Definition des Ising-Modells wird nach einigen Vereinfachungen zuerst der eindimensionale Fall detailliert durchgerechnet. Anschließend werden die Ergebnisse des zweidimensionalen Ising-Modells präsentiert und anhand dieser der Phasenübergang zwischen Ferromagnetismus und Paramagnetismus gezeigt.

Bei dieser Ausarbeitung handelt es sich nur um eine kurze Zusammenstellung der Ergebnisse des zweidimensionalen Modells. Für die genaue Herleitung wird auf mein lange Ausarbeitung verwiesen, in der das zweidimensionale Modell vollständig durchgerechnet wird.

Diese kann unter <http://dl.dropbox.com/u/2623003/Ising%20Modell.zip> heruntergeladen werden.

1.2 Historisches

Das Modell wurde erstmals 1920 von W. Lenz zur Beschreibung des Ferromagnetismus vorgeschlagen. Er übergab die Lösung des Problems an seinen Studenten E. Ising, der 1925 eine Lösung des eindimensionalen Modells veröffentlichte. Leider blieb in einer Dimension der erhoffte Phasenübergang aus was Ising dazu veranlasste sich nicht weiter mit dem Modell zu beschäftigen. Das Interesse der physikalischen Gemeinschaft am Ising-Modell erwachte wieder, als R. Piers 1936 einen Existenzbeweis eines Phasenübergangs im zweidimensionalen Ising-Modell erbrachte. Es dauerte jedoch weitere 5 Jahre bis L. Onsager 1941 eine erste exakte Lösung des Ising-Modells veröffentlichte. Diese sehr komplizierte Lösung wurde dann im Jahre 1949 von B. Kaufman mit Hilfe der Spinoranalysis stark vereinfacht. Erst 1952 gelang C.N. Yang die Herleitung der spontanen Magnetisierung, des ininteressierenden Ordnungsparameters, wodurch der Phasenübergang eindeutig und endgültig untermauert wurde. In den nachfolgenden Jahren kam die sogenannte kombinatorische Lösung auf, die heute in den meisten Lehrbüchern zu finden ist. Eine weitere bedeutende Lösungsmethode wurde 1964 von Schultz, Mattis und Lieb entwickelt. Mittels einer Jordan-Wigner-Transformation gelang ihnen eine geeignete Fermionisierung der klassischen Spin-Freiheitsgrade. Heutzutage sind in höheren Dimensionen $d > 2$ aus Mangel an analytischen Lösungen Computersimulationen mit Monte-Carlo Verfahren gängig zur Lösung des Problems.

2 Onsager-Kaufman Lösung des Ising Modells

2.1 Grundlagen

Betrachte ein rechteckiges, d-dimensionales Gitter mit $N = n^d$ festen Punkten. Jedem Gitterpunkt sei eine Spinvariable \vec{S}_i zugeordnet. Dieses Modell ist das Heisenberg-Modell des Ferromagnetismus. Das Ising-Modell geht nun aus diesem Modell durch folgende Vereinfachungen hervor:

- Die Spinvariable kann lediglich 2 diskrete Zustände ± 1 annehmen.
D.h. man betrachtet z.B. nur die z-komponente des Spins. Damit ist $s_i = \pm 1$
- Die Wechselwirkung der Spins untereinander erfolgt jeweils nur mit den nächsten Nachbarn

Betrachtet man diese Anordnung nun in einem äußeren Magnetfeld so ist dies der allgemeinste Fall des Ising-Modells des Ferromagnetismus.

Die Wechselwirkungsenergie von N Spins von denen je p Spins miteinander in Wechselwirkung stehen ist mittels der Wechselwirkungsenergie $\epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_p}$ gegeben durch:

$$E(s_1, \dots, s_N) = - \sum_{\langle i_1, \dots, i_p \rangle} \epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_p} s_{i_1} s_{i_2} \dots s_{i_p} \quad (2.1)$$

Wobei sich die Summe über $\langle i_1, \dots, i_p \rangle$ bedeutet, dass je über p Spins aus paarweise, unmittelbar benachbarten Gitterpunkten summiert wird.

In der folgenden Rechnung werden wir noch zwei weitere Vereinfachungen vornehmen:

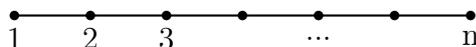
- Es wird jeweils nur die Wechselwirkung zweier Spins miteinander Berücksichtigt
- Die Wechselwirkungsenergie ϵ_{ij} ist räumlich konstant (isotrope Wechselwirkung)
Daher ist $\epsilon_{ij} = \epsilon = const$

Damit ergibt sich für die Wechselwirkungsenergie das Gitters:

$$E(s_1, \dots, s_N) = -\epsilon \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j \quad (2.2)$$

2.2 Das 1-dimensionale Ising-Modell

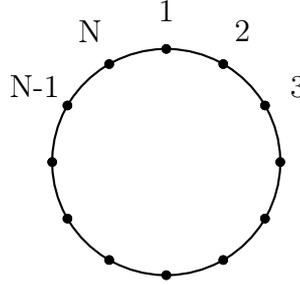
Betrachten wir zunächst denn 1-dimensionalen Fall, d.h. $d = 1$ und die Gesamtzahl der Spins wird zu $N=n$.



Aus später ersichtlichen Gründen fordern wir periodische Randbedingungen bei Hinzufügen eines weiteren Spins. Damit gilt

$$s_{n+1} := s_1 \quad (2.3)$$

Damit verändern wir die Topologie der obigen Kette zu der eines Kreises.



Topologie des eindimensionalen Ising-Modells

Die Energie des Systems in einem äußeren Magnetfeld B ist, mit Hilfe von (2.2) gegeben durch:

$$E = -\epsilon \sum_{k=1}^N s_k s_{k+1} - B \sum_{k=1}^N s_k \quad (2.4)$$

Die Zustandssumme ist

$$Z(B, T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \exp(\beta \sum_{k=1}^N (\epsilon s_k s_{k+1} + B s_k)) \quad (2.5)$$

wobei jedes s_k unabhängig die Werte ± 1 annimmt.

Zur Lösung dieses Problems benutzen wir im folgenden die Transfermatrix-Methode. Hierzu schreiben wir zuerst (2.5) in der symmetrisierten Form

$$Z(B, T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \exp(\beta \sum_{k=1}^N (\epsilon s_k s_{k+1} + \frac{1}{2} B (s_k + s_{k+1}))) \quad (2.6)$$

Dies stimmt auf Grund von (2.3) mit (2.5) überein.

Definiere nun eine zweireihige Matrix \mathcal{P} , so dass ihre Elemente durch

$$\langle s | \mathcal{P} | s' \rangle = e^{\beta(\epsilon s s' + \frac{1}{2} B (s + s'))} \quad (2.7)$$

gegeben sind. Daher ergibt sich eine explizite Darstellung für \mathcal{P}

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} e^{\beta(\epsilon+B)} & e^{-\beta\epsilon} \\ e^{-\beta\epsilon} & e^{\beta(\epsilon-B)} \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Entwickle nun \mathcal{P} in Eigenvektoren mit Eigenwerten λ_1, λ_2

$$\mathcal{P} = \lambda_1 a_1(s_1) a_1(s_2) + \lambda_2 a_2(s_1) a_2(s_2) \quad (2.9)$$

Die Eigenvektoren sind orthogonal und können als normiert angenommen werden

$$\sum_{s=\pm 1} a_i(s) a_k(s) = \delta_{ik} \Leftrightarrow \sum_{s=\pm 1} |s\rangle \langle s| = 1 \quad (2.10)$$

Damit ergibt sich für die Zustandssumme mittels (2.6), (2.7) und (2.10)

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \langle s_1 | \mathcal{P} | s_2 \rangle \langle s_2 | \mathcal{P} | s_3 \rangle \dots \langle s_N | \mathcal{P} | s_1 \rangle \\ &= \sum_{s_1} \langle s_1 | \mathcal{P}^N | s_1 \rangle = \text{Tr}(\mathcal{P}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \end{aligned} \quad (2.11)$$

2. Onsager-Kaufman Lösung des Ising Modells

Wobei des letzte Gleichheitszeichen gilt, da die Spur einer Matrix von deren Darstellung unabhängig ist. Dass Z die Spur der N -ten Potenz einer Matrix ist, ist eine Folge der periodischen Randbedingungen (2.3).

Die beiden Eigenwerte der Matrix \mathcal{P} können durch einfache Rechnung bestimmt werden.

$$\lambda_{1/2} = e^{\beta\epsilon} [\cosh(\beta B) \pm \sqrt{e^{-4\beta\epsilon} + \sinh^2(\beta B)}] \quad (2.12)$$

Damit ist also $\lambda_1 > \lambda_2$ für alle B . Betrachten wir weiter den Fall $N \rightarrow \infty$ so spielt nur der größere der beiden Eigenwerte eine Rolle, da

$$\frac{1}{N} \ln(Z) = \ln(\lambda_1) + \frac{1}{N} \ln\left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^N\right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \ln(\lambda_1) \quad (2.13)$$

Damit lassen sich die thermodynamischen Funktionen bestimmen.

Helmholtzsche freie Energie pro Spin

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} F(B, T) &= -\frac{kT}{N} \ln(Z) = -kT \ln(\lambda_1) \\ &= -\epsilon - kT \ln(\cosh(\beta B) + \sqrt{e^{-4\beta\epsilon} + \sinh^2(\beta B)}) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Magnetisierung pro Spin

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} M(B, T) &= -\frac{1}{N} \frac{\partial F(B, T)}{\partial B} \\ &= \frac{\sinh(\beta B)}{\sqrt{e^{-4\beta\epsilon} + \sinh^2(\beta B)}} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Es gilt

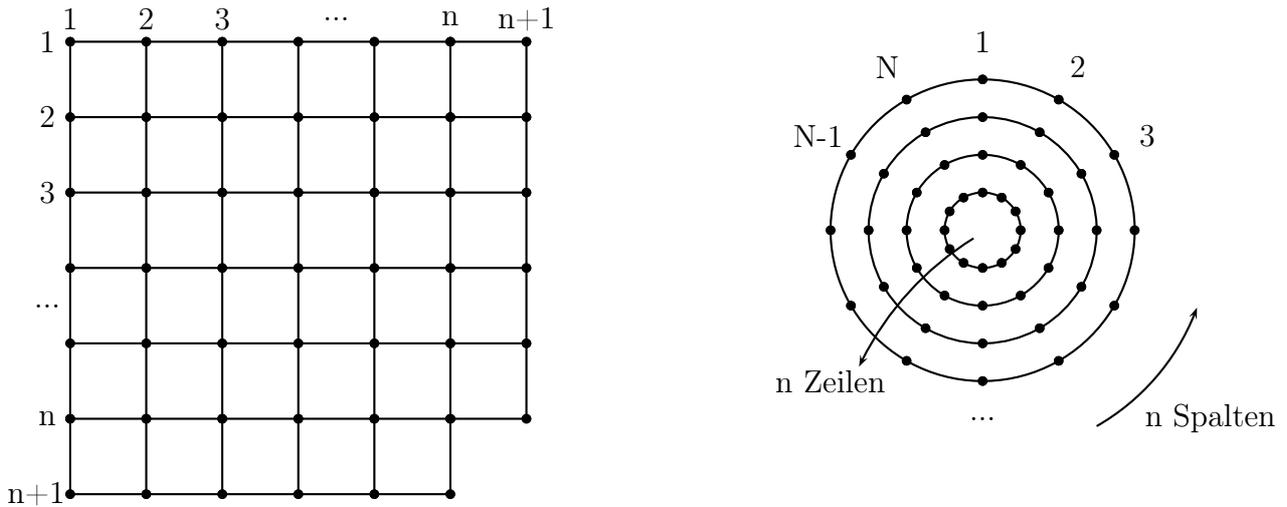
$$\frac{1}{N} M(0, T) = 0 \quad \forall T > 0 \quad (2.16)$$

Daher zeigt das eindimensionale Ising-Modell nie ferromagnetische Eigenschaften. Der Grund hierfür liegt darin, dass bei einer gegebenen Temperatur zur Minimalisierung der Freien Energie $F = U - TS$ die Minimalisierung der inneren Energie, durch Ausrichtung der Spins, und die Maximalisierung der Entropie, durch eine statistische Verteilung der Spins, in Konkurrenz stehen. Im eindimensionalen Modell gibt es noch nicht genügend nächste Nachbarn, so dass keine spontane Ausrichtung der Spins zustande kommt. Der Fehler, dass die, auf der Mean-Field-Näherung beruhende, Weißsche Theorie auch in einer Dimension ein Phasenübergang vorhergesagt liegt daran, dass dort die Fluktuationen vernachlässigt werden, die diesen in einer Dimension gerade verhindern. Weiterhin sieht man, dass im eindimensionalen Ising-Modell kein Phasenübergang auftritt.

2.3 Das 2-dimensionale Ising-Modell

2.3.1 Topologie und Zustandssumme

Betrachten wir nun den zweidimensionalen Fall, d.h. $d=2$ und die Gesamtzahl der Spins wird zu $N = n^2$. Das Gitter besteht also aus n Zeilen und n Spalten. Wir erweitern nun den Aufbau um eine Spalte und eine Zeile und fordern wieder periodische Randbedingungen. Dies ist keine Einschränkung da im weiteren nur der Grenzfall $n \rightarrow \infty$ betrachtet wird. Damit prägen wir dem Gitter, analog zur eindimensionalen Kette, die Topologie eines Torus auf.



Im folgenden bezeichne μ_α ($\alpha = 1, \dots, n$) die Gesamtheit aller Spinkoordinaten der α -ten Reihe

$$\mu_\alpha = \{s_1, \dots, s_n\}_{\alpha\text{-te Reihe}} \quad (2.17)$$

Die oben geforderten Randbedingungen sind in dieser Schreibweise also gegeben durch:

$$\begin{aligned} \mu_{n+1} &= \mu_1 \\ s_{n+1} &= s_1 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Wir können nun die gesamte Wechselwirkungsenergie des Gitters in drei Teile aufteilen:

- Wechselwirkungsenergie zweier Reihen miteinander

$$E(\mu_\alpha, \mu_{\alpha+1}) = -\epsilon \sum_{k=1}^n s_k^\alpha s_k^{\alpha+1} \quad (2.19)$$

- Wechselwirkungsenergie der Spins innerhalb einer Reihe

$$E_{int}(\mu_\alpha) = -\epsilon \sum_{k=1}^n s_k^\alpha s_{k+1}^\alpha \quad (2.20)$$

- Wechselwirkungsenergie der Spins mit einem äußeren Magnetfeld B

$$E_{ext}(\mu_\alpha) = -B \sum_{k=1}^n s_k^\alpha \quad (2.21)$$

2. Onsager-Kaufman Lösung des Ising Modells

Somit ergibt sich die Gesamtenergie des Gitters in einem äußeren Magnetfeld B zu:

$$E(\mu_1, \dots, \mu_n) = \sum_{\alpha=1}^n [E(\mu_\alpha, \mu_{\alpha+1}) + E_{int}(\mu_\alpha) + E_{ext}(\mu_\alpha)] \quad (2.22)$$

Und damit die Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_n} \exp\{-\beta E(\mu_1, \dots, \mu_n)\} \\ &= \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_n} \exp\{-\beta \sum_{\alpha=1}^n [E(\mu_\alpha, \mu_{\alpha+1}) + E_{int}(\mu_\alpha) + E_{ext}(\mu_\alpha)]\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Analog zum eindimensionalen Fall gehen wir nun wieder in die Matrixschreibweise über. Dazu definieren wir eine 2^n -reihige Matrix \mathcal{P} , so dass ihre Matrixelemente durch

$$\langle \mu | \mathcal{P} | \mu' \rangle = \exp\{-\beta [E(\mu, \mu') + E_{int}(\mu) + E_{ext}(\mu)]\} \quad (2.24)$$

gegeben sind. Analog zum eindimensionalen Fall gilt wieder

$$\sum_{\mu_\alpha} |\mu_\alpha \rangle \langle \mu_\alpha| = 1 \quad (2.25)$$

und damit für die Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_n} \langle \mu_1 | \mathcal{P} | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | \mathcal{P} | \mu_3 \rangle \dots \langle \mu_n | \mathcal{P} | \mu_1 \rangle \\ &= \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | \mathcal{P}^n | \mu_1 \rangle = \text{Tr}(\mathcal{P}^n) = \sum_{\alpha=1}^{2^n} (\lambda_\alpha)^n \end{aligned} \quad (2.26)$$

Wobei im letzten Schritt wieder verwendet wurde, dass die Spur unabhängig von der Darstellung ist, so dass wir \mathcal{P} in Diagonalform annehmen. Daher sind die λ_α die 2^n Eigenwerte der matrix \mathcal{P} .

Da wir uns im weiteren nur mit dem Grenzfall $n \rightarrow \infty$ beschäftigen vereinfacht sich die Zustandssumme noch weiter. Dies folgt, da erwartet wird, dass die Eigenwerte auf Grund von (2.26) von der Ordnung e^n sind, da $E(\mu, \mu')$, $E_{int}(\mu)$ und $E_{ext}(\mu)$ von der Ordnung n sind. Ist dies der Fall, so wird

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln(\lambda_\alpha) = \text{endlich} \quad \forall \alpha = 1, \dots, 2^n \quad (2.27)$$

Sind weiter alle Eigenwerte positiv und bezeichne λ_{max} den größten Eigenwert so gilt:

$$(\lambda_{max})^n \leq Z \leq 2^n (\lambda_{max})^n \quad (2.28)$$

$$\iff \frac{1}{n} \ln(\lambda_{max}) \leq \frac{1}{n^2} \ln(Z) \leq \frac{1}{n} \ln(\lambda_{max}) + \frac{1}{n} \ln(2) \quad (2.29)$$

Im Grenzübergang $n \rightarrow \infty$ folgt daraus:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(Z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln(\lambda_{max}) \quad (2.30)$$

Bei der weiteren Lösung des Eigenwertproblems wird sich herausstellen, dass unsere Annahmen beide erfüllt sind. Daher ist zur exakten Lösung des Systems im Grenzübergang $n \rightarrow \infty$ nur der größte Eigenwert λ_{max} der Matrix \mathcal{P} zu bestimmen. Diese Rechnung ist sehr kompliziert, so dass im weiteren nur die Ergebnisse angegeben werden. Für die genaue Rechnung verweise ich auf meine lange Auswertung die unter der Webadresse, die im Ersten Kapitel angegeben wird, heruntergeladen werden kann.

2.3.2 Die Zustandssumme

Aus dem Eigenwertproblem der Matrixdarstellung des Ising-Modells erhalten wir folgenden größten Eigenwert

$$\Lambda = e^{\frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_3 + \dots + \gamma_{2n-1})} \quad (2.31)$$

Mittels der Formel

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(Z) = \frac{1}{2} \ln[2 \sinh(2\beta\epsilon)] + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln(\Lambda) \quad (2.32)$$

können wir nun die Zustandssumme berechnen. Daraus ergibt sich nach einigen weiteren Umformungen nun die geschlossene Form für die Zustandssumme

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln[Z] = \ln[2 \cosh(2\beta\epsilon)] + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\vartheta \ln\left[\frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2(\vartheta)})\right] \quad (2.33)$$

2.3.3 Die thermodynamischen Funktionen

Aus (2.151) können wir sofort die Helmholtzsche freie Energie pro Spin $F(0, T)$ bestimmen

$$\begin{aligned} \beta F(0, T) &= - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln[Z] \\ &= -\ln[2 \cosh(2\beta\epsilon)] - \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\vartheta \ln\left[\frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2(\vartheta)})\right] \end{aligned} \quad (2.34)$$

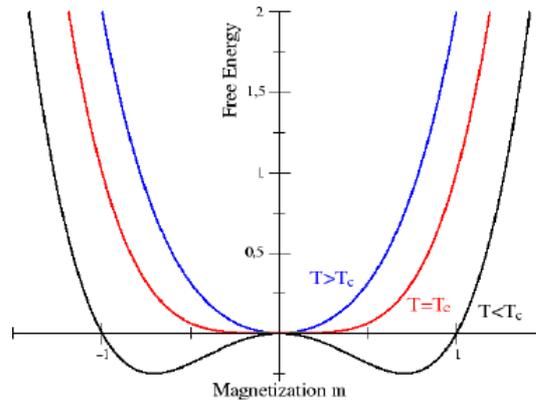


Abbildung 1: Freie Energie

Die innere Energie pro Spin $E(0, T)$ ist

$$E(0, T) = -\epsilon \coth(2\beta\epsilon) \left[1 + \frac{2}{\pi} \kappa' K_1(\kappa)\right] \quad (2.35)$$

Wobei $K_1(\kappa)$ gegeben durch

$$K_1(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \frac{1}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2(\vartheta)}} \quad (2.36)$$

2. Onsager-Kaufman Lösung des Ising Modells

das vollständige elliptische Integral 1. Ordnung ist. Sowie

$$\begin{aligned}\kappa &= \frac{2\sinh(2\beta\epsilon)}{\cosh^2(2\beta\epsilon)} \\ \kappa' &= 2\tanh^2(2\beta\epsilon) - 1 \\ \kappa^2 + \kappa'^2 &= 1\end{aligned}\tag{2.37}$$

Die spezifische Wärme ergibt sich mittels

$$C(0, T) = \frac{\partial E(0, T)}{\partial T} = \frac{\partial E(0, T)}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} = -\frac{1}{kT^2} \frac{\partial E(0, T)}{\partial \beta}\tag{2.38}$$

zu

$$\frac{1}{k}C(0, T) = \frac{2}{\pi}(\beta\epsilon \coth(2\beta\epsilon))^2 \{2K_1(\kappa) - 2E_1(\kappa) - (1 - \kappa')[\frac{\pi}{2} + \kappa'K_1(\kappa)]\}\tag{2.39}$$

Wobei $E_1(\kappa)$ gegeben durch

$$E_1(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2(\vartheta)}\tag{2.40}$$

das vollständige elliptische Integral 2. Ordnung ist.

Man sieht nun, dass die spezifische Wärme bei $\kappa = 1 \iff \kappa' = 0$ eine Singularität besitzt, da das vollständige elliptische Integral 1. Ordnung $K_1(\kappa)$ bei $\kappa = 1$ eine Singularität hat. Dies kann nun dazu verwendet werden um durch (2.159) die kritische Temperatur (Curie-Temperatur) T_c zu definieren:

$$\begin{aligned}2\tanh^2\left(\frac{2\epsilon}{kT_c}\right) &= 1 \implies kT_c \approx 2,269185 \epsilon \\ \text{bzw. : } \sinh\left(\frac{2\epsilon}{kT_c}\right) &= 1 \\ \cosh\left(\frac{2\epsilon}{kT_c}\right) &= \sqrt{2} \\ e^{-\frac{2\epsilon}{kT_c}} &= \sqrt{2} - 1\end{aligned}\tag{2.41}$$

Damit gilt:

Alle Thermodynamischen Funktionen haben irgendeine Singularität bei $T = T_c$

Es gilt durch einfaches nachrechnen:

$$\begin{aligned}K_1(\kappa) &\approx \ln\left(\frac{4}{\kappa'}\right) \\ \frac{dK_1(\kappa)}{d\kappa} &\approx \frac{\pi}{2} \\ E_1(\kappa) &\approx 1\end{aligned}\tag{2.42}$$

Daher sieht man, dass die innere Energie $E(0, T)$ bei $T = T_c$ stetig ist.

Für die spezifische Wärme gilt, nach Entwicklung um $T = T_c$ näherungsweise

$$\frac{1}{k}C(0, T) \approx \frac{2}{\pi} \left(\frac{2\epsilon}{kT_c}\right)^2 \left[-\ln\left(\frac{2\epsilon}{kT_c^2} |T - T_c|\right) - \left(1 + \frac{\pi}{4}\right)\right]\tag{2.43}$$

Man sieht, dass $C(0, T)$ für $|T - T_c| \rightarrow 0$ logarithmisch divergiert. Daher wird der kritische Exponent zu $\alpha = 0$ Weiter gilt, da erst die zweite Ableitung der freien Energie eine unstetigkeitsstelle aufweist, dass es sich hierbei tatsächlich um einen Phasenübergang zweiter Art handelt.

Aus der allgemeinen Theorie der Phasenübergänge sieht man, dass die Magnetisierung die Rolle des Ordnungsparameters hat. Da unsere gesammte Berechnung jedoch in abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes gemacht wurde, kann aus unserer Lösung die spontane Magnetisierung $m(0, T) = (\frac{\partial Z}{\partial B})_{B=0}$ nicht berechnet werden. Die Berechnung der spontanen magnetisierung wurde von Yang durchgeführt. Sie ist so kompliziert wie die von uns durchgeführte. Das Problem liegt darin, dass der Term mit der Matrix \mathcal{V}_3 nicht mit \mathcal{U} vertauscht und man daher nur Nebendiagonalelemente besitzt. Daher kann die Berechnung nicht analog zu der hier gezeigten durchgeführt werden. Im weiteren wollen wir hier nicht weiter auf die Berechnung der spontanen magnetisierung eingehen und geben nur das erstaunlich einfache Ergebnis an:

$$m(0, T) = \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ \frac{(1+z^2)^{\frac{1}{4}} (1-6z^2+z^4)^{\frac{1}{8}}}{\sqrt{1-z^2}} & (T < T_c) \end{cases} \quad (2.44)$$

mit $z = e^{-2\beta\epsilon}$
 $\Rightarrow z_c = \sqrt{2} - 1$

Entwicklung um $z = z_c$ ergibt

$$m(o, T) \approx [4(\sqrt{2} + 2) (z_c - z)]^{\frac{1}{8}} \quad (2.45)$$

Daher ergibt sich für den kritischen Exponenten $\beta = \frac{1}{8}$.

Eine graphische Darstellung der spontanen Magnetisierung ist in *Abb.: 3* gezeigt.

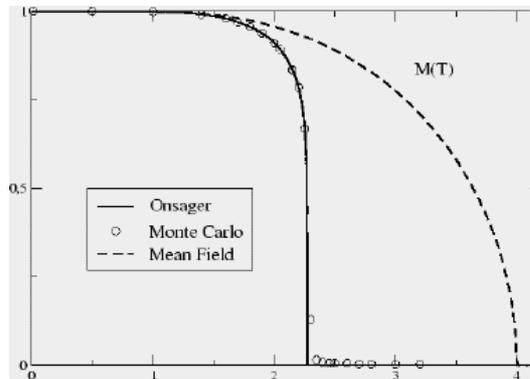


Abbildung 2: spontane Magnetisierung

2.3.4 Zusammenfassung und Ausblick

Die durchgeführte Berechnung zeigt, dass wir im zweidimensionalen Ising-Modell ein Phasenübergang zweiter Art vorkommt. Das Ising-Modell ist bis heute das einzige, nicht triviale Beispiel eines solchen Phasenübergangs, das exakt gelöst werden kann. Weiter sieht man, dass in diesem Modell eine spontane Ausrichtung aller Spins möglich ist. In der Realität sind in einem Ferromagnetischen Stoff jedoch nur einzelne Bereiche, die Weißschen-Bereiche, des Stoffes vollständig ausgerichtet. Daher beschreibt unser Modell im weiteren

2. Onsager-Kaufman Lösung des Ising Modells

Sinne nur einen Weißschen-Bezirk. Die kollektive Ausrichtung über das gesamte Material geschieht durch Anlegen eines äußeren Magnetfeldes. Dadurch richten sich die Weißschen-Bezirke in Richtung des Magnetfeldes aus (Ferromagnet). innerhalb eines Bezirks bleibt die Ausrichtung jedoch bis zur kritischen temperatur T_c immer erhalten.

Eine große Einschränkung bei der Beschreibung des Ferromagnetismus ist, dass in diesem modell lediglich zwei Spinrichtungen zugelassen werden. Daher greift man hier eher auf den in der Einleitung erwähnten Heisenberg-Ferromagnetismus zurück. Dieser lässt jedoch bereits keine exakte Lösung mehr zu.

Abgesehen vom Ferromagnetismus hat das Ising-Modell noch weitere Anwendungsmöglichkeiten. Die bekanntesten Beispiele sind das Gittergas, die zwei Spinrichtungen stehen hierbei für die Zustände besetzt und unbesetzt, wodurch über Clusterbildung der Phasenübergang zum Flüssigen dargestellt werden kann, sowie die binäre Legierung, ein Kristallgitter bestehend aus zwei verschiedenen Atomsorten, bei dem die Strukturbildung untersucht wird. Des weiteren wird das Ising-Modell nicht nur bei physikalischen Problemen benutzt. Beispiele hierfür sind der Ising-Fisch, ein Fisch der nur in zwei Richtungen schwimmen kann und sich dabei an seinen nächsten Nachbarn orientiert. Damit kann das Schwarmverhalten von Fischen beschrieben werden. Sowie die meinungsbildung im Zweikammersystem.

Eine weitere sehr wichtige Anwendung in der Physik ist die Prüfung der Güte von Näherungsmethoden. Da das zweidimensionale Ising-Modell exakt gelöst wurde kann man die Güte der Näherung durch direkten vergleich der Ergebnisse erhalten.

Des weiteren sei darauf verwiesen, dass es noch weitere Methoden zur exakten Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells gibt. Verschiedene Lösungen sind zum Beispiel in *Landau Lifschitz "Lehrbuch der theoretischen Physik V Statistische Physik Teil 1"* oder *T. Schultz, D. Mattis, E. Lieb, "Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions"*. Da in diesem Seminarvortrag jedoch auch die in der statistischen Physik sehr wichtige transfermatrixmethode vermittelt werden wollte, wurde auf diese Lösungen nicht weiter eingegangen.

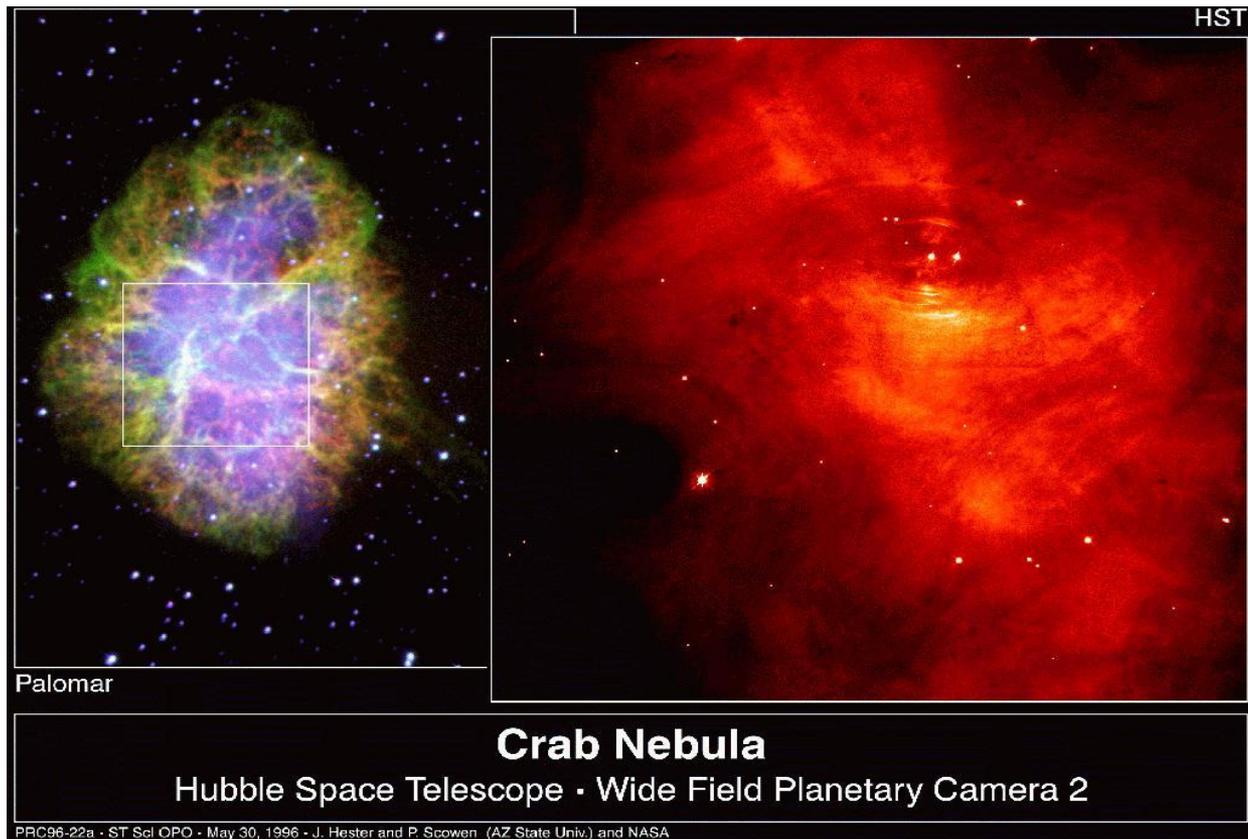
Das dreidimensionale Ising-Modell wurde bis heute noch nicht exakt gelöst. Jedoch ist auf Grund sehr guter Näherungsmethoden und numerischer Berechnungen zu erwarten, dass in drei Dimensionen keine neuen Effekte zu erwarten sind.

Literatur

- [1] KERSON HUANG: *Statistische Mechanik (Dritter Band)* John Wiley and Sons, Inc., New York (1964)
- [2] LARS ONSAGER: *A two-dimensional model with an order-disorder transition* Physical Review, Vol 65, Number 3/4 (1944).
- [3] BRURIA KAUFMAN: *Partition function evaluated by spinor analysis* Physical Review, Vol 76, Number 8 (1949)
- [4] C.N. YANG: *The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising-model* Physical Review, Vol 85, Number 5 (1952)
- [5] R. BRAUER, H. WEYL: *Spinors in n dimensions* American Journal of Mathematics, Vol 57, Number 2 (1935)

Neutronensterne –

Materie unter extremen Bedingungen



Gliederung

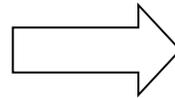
1. Historischer Überblick
2. Entstehung und Eigenschaften
3. Materie im Innersten – QM
 - Überblick QCD
 - Das QCD Phasendiagramm
 - Color Superconducting QM
4. Fazit

1. Geschichte und Entdeckung

- 1932 Entdeckung des Neutrons durch Chadwick
- 1934 Baade/Zwicky: Entstehung und Existenz von NS in Supernovae
- 1939 Berechnung von NS-Modell durch Oppenheimer/Volkoff
- 1967 Hewish et al. entdecken Pulsar
- 1968 Gerlach/Wheeler: Dritte Familie von kompakten Sternen möglich -> Quarksterne
- 1975 Massenbestimmung an Binärpulsar $\sim 1.44M_{\odot}$
- Heute etwa 2000 bekannte Objekte

2.1 Entstehung von NS

Vorr.: Stern mit $M > 8M_{\odot}$ nach Heliumbrennen

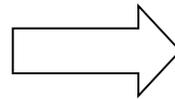


-Kollaps des Kerns
-Supernova

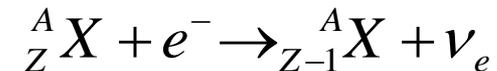
Wenn:

$$-1,44M_{\odot} < M < 3M_{\odot}$$

$$-\rho \approx 1,14 \cdot 10^9 \text{ g/cm}^3$$



Kerne immer neutronenreicher durch inversen β -Zerfall



$\rho > 4,3 \cdot 10^{11} \text{ g/cm}^3$
"neutron drip"



Freie, entartete Neutronen (Druck stoppt Kollaps)

2.2 Eigenschaften von NS

- Masse $M \approx 1,35-2 M_{\odot}$

- Radius $R \approx 10-15 \text{ km}$

⇒ EXTREM hohe Dichte
 $\rho \approx 10^{14} - 10^{15} \text{ g/cm}^3$
(vgl. $\rho_{\text{nuc}} \approx 3 \cdot 10^{14} \text{ g/cm}^3$)

- Gravitationsfeld $2 \cdot 10^{11}$ stärker als Erdfeld,
Fluchtgeschwindigkeit $1/3c$

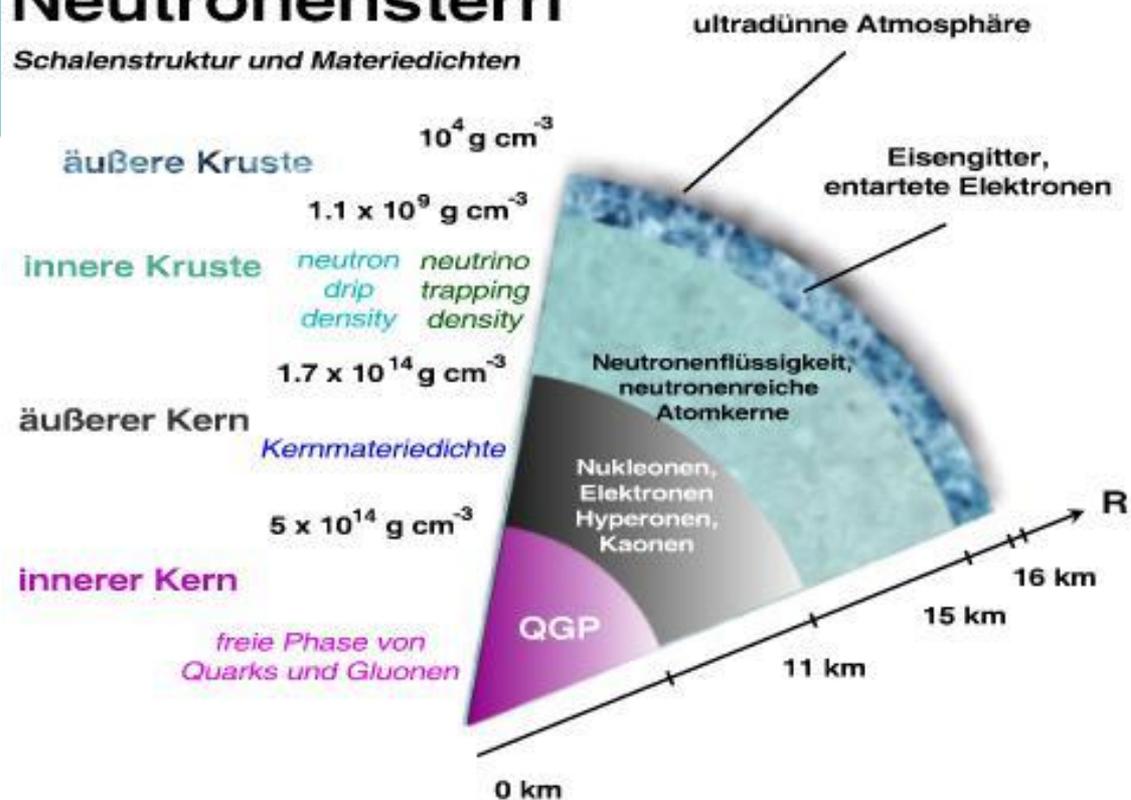
- Temperatur T etwa 1Mio Kelvin

- Starke Magnetfelder $\sim 10^8$ Tesla

2.3 Der innere Aufbau

Neutronenstern

Schalenstruktur und Materiedichten



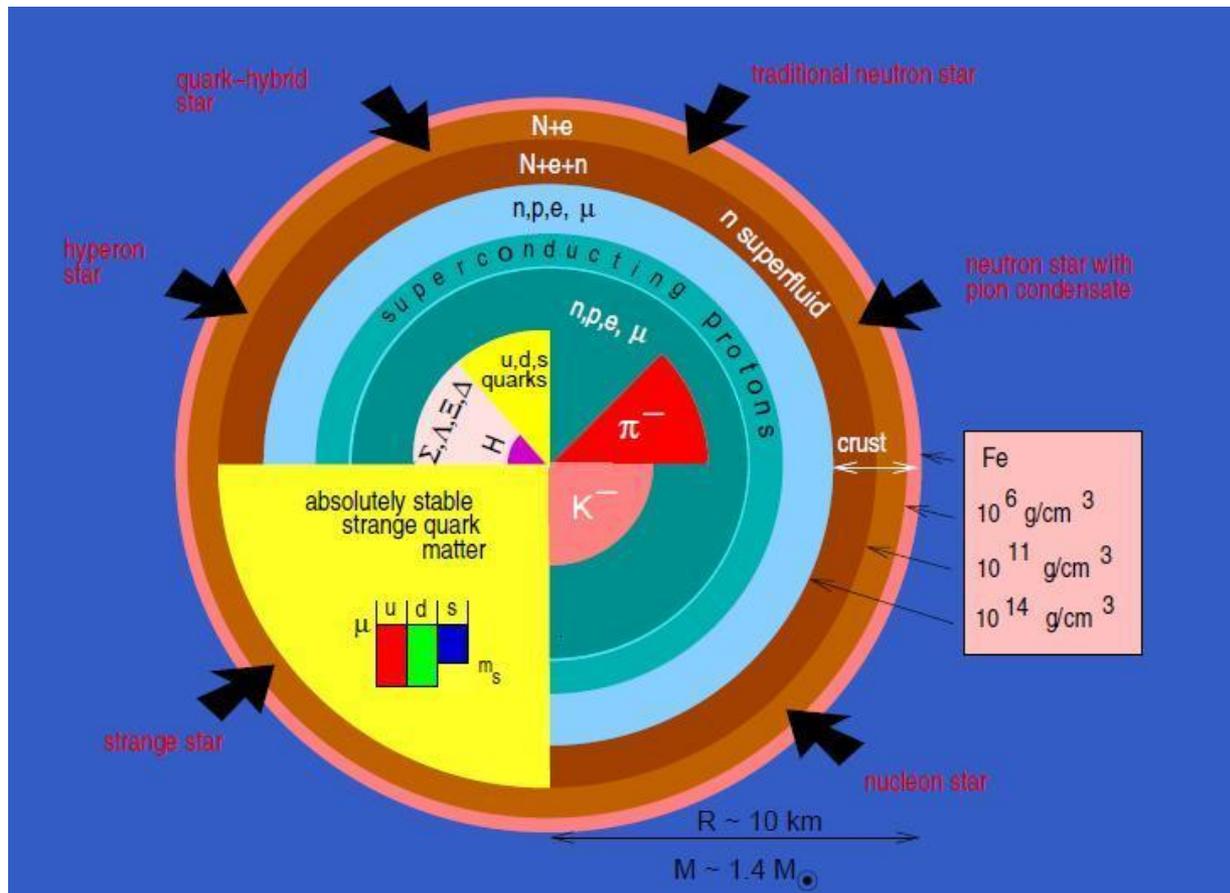
Äußere Kruste:
Gitter von Fe-56
Atomen, entartetes
Elektronengas

Innere Kruste:
neutronenreiche
Kerne N, freie n, e-

Äußerer Kern:
superfluide
Neutronen, massive
Baryonen

Innerer Kern:
Vielfältige
Möglichkeiten...

Mögliche Vielfalt des NS-Kerns



2.4 Zustandsgleichung NS

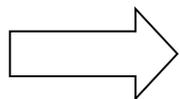
- TOV:
$$\frac{dP}{dr} = -\frac{G\rho m}{r^2} \cdot \frac{(1+\frac{P}{\rho})(1+\frac{4\pi Pr^3}{m})}{(1-\frac{2Gm}{r})}$$

- Masse
$$\frac{dm(r)}{dr} = 4\pi r^2 \rho(r)$$

- EoS: Enthält Mikrophysik $P=P(\rho)$

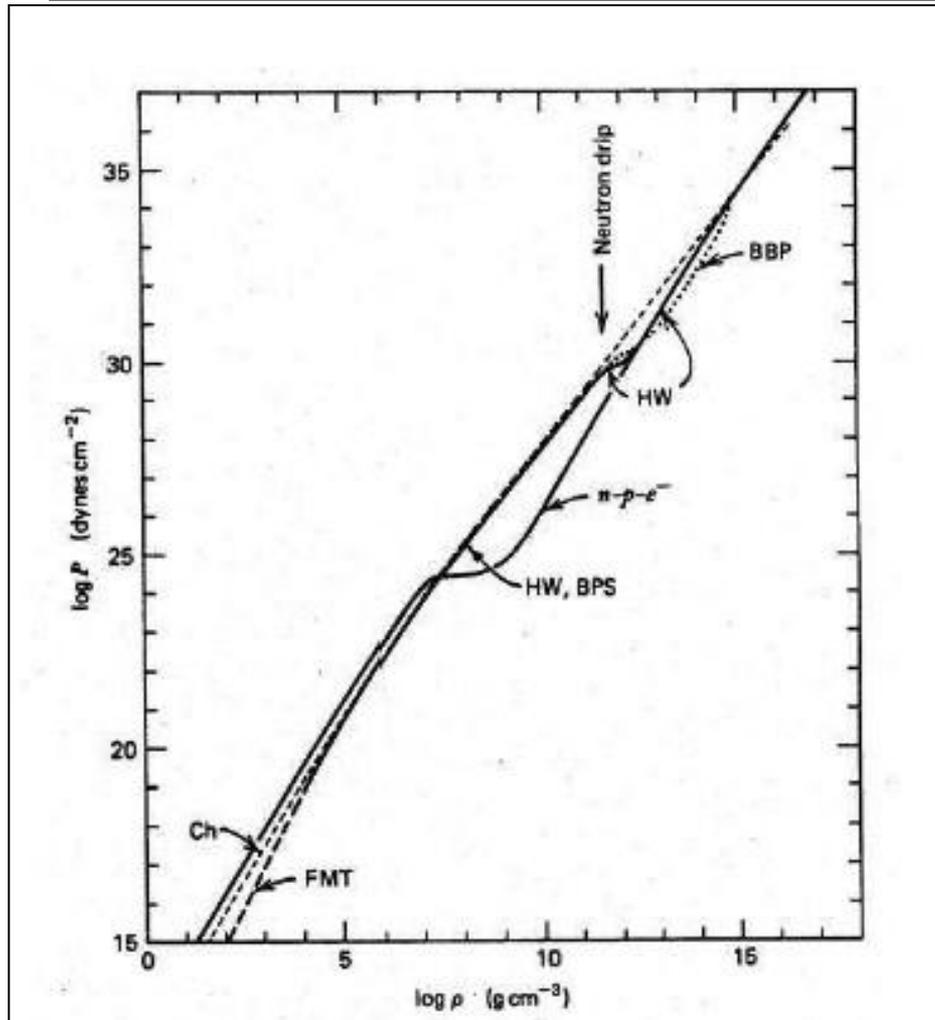
- großer Dichtebereich, viele Teilchen etc.

- WW teilweise nicht gut erforscht



Für $\rho < \rho_{\text{drip}}$ viel Modelle (nur Neutronen, +WW mit Nuklei, β -Equilibrium etc.)

Zustandsgleichungen im Vergleich



?? $\rho \gg \rho_{\text{nuc}}$??

3. QCD und Quark matter

Quarks:

- Spin $\frac{1}{2}$ Fermionen
- Farbladung (r, g, b)
- Baryonenzahl $\frac{1}{3}$
- An allen 4 WW beteiligt

Gluonen:

- WW-Bosonen (Spin 1)
- 8 Farbfelder

quark flavor	symbol	charge Q/e	constituent mass Σ (MeV/ c^2)	current mass m (MeV/ c^2)
down	d	$-\frac{1}{3}$	~ 350	~ 7
up	u	$+\frac{2}{3}$	~ 350	~ 3
strange	s	$-\frac{1}{3}$	~ 550	~ 140
charm	c	$+\frac{2}{3}$	~ 1800	~ 1800
bottom	b	$-\frac{1}{3}$	$\sim 4.2 \times 10^3$	$\sim 4.2 \times 10^3$
top	t	$+\frac{2}{3}$	$\sim 170 \times 10^3$	$\sim 170 \times 10^3$

QCD - 3 bedeutende Prinzipien

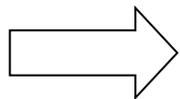
1. Confinement: keine freie Quarks
2. Asymptotische Freiheit: Quarks im Kern quasi-frei
3. Chirale Symmetriebrechung erzeugt Masse

qq-WW-Potential:

$$V(r) = -\frac{A}{r} + kr$$

$$A=4a_s/3$$

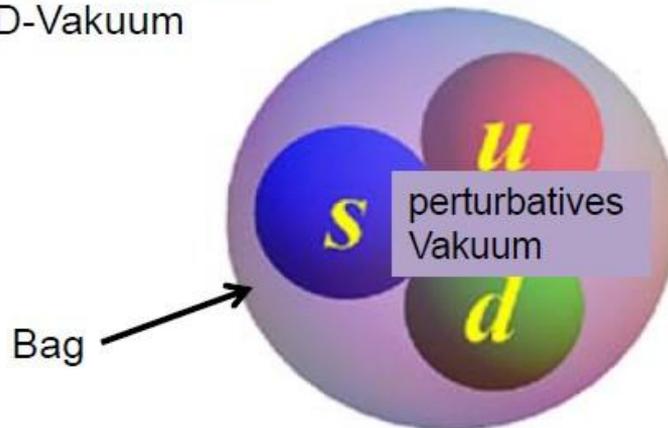
$$K=0,9 \text{ GeV/fm}$$



Für große Abstände WW stark, „string tension“

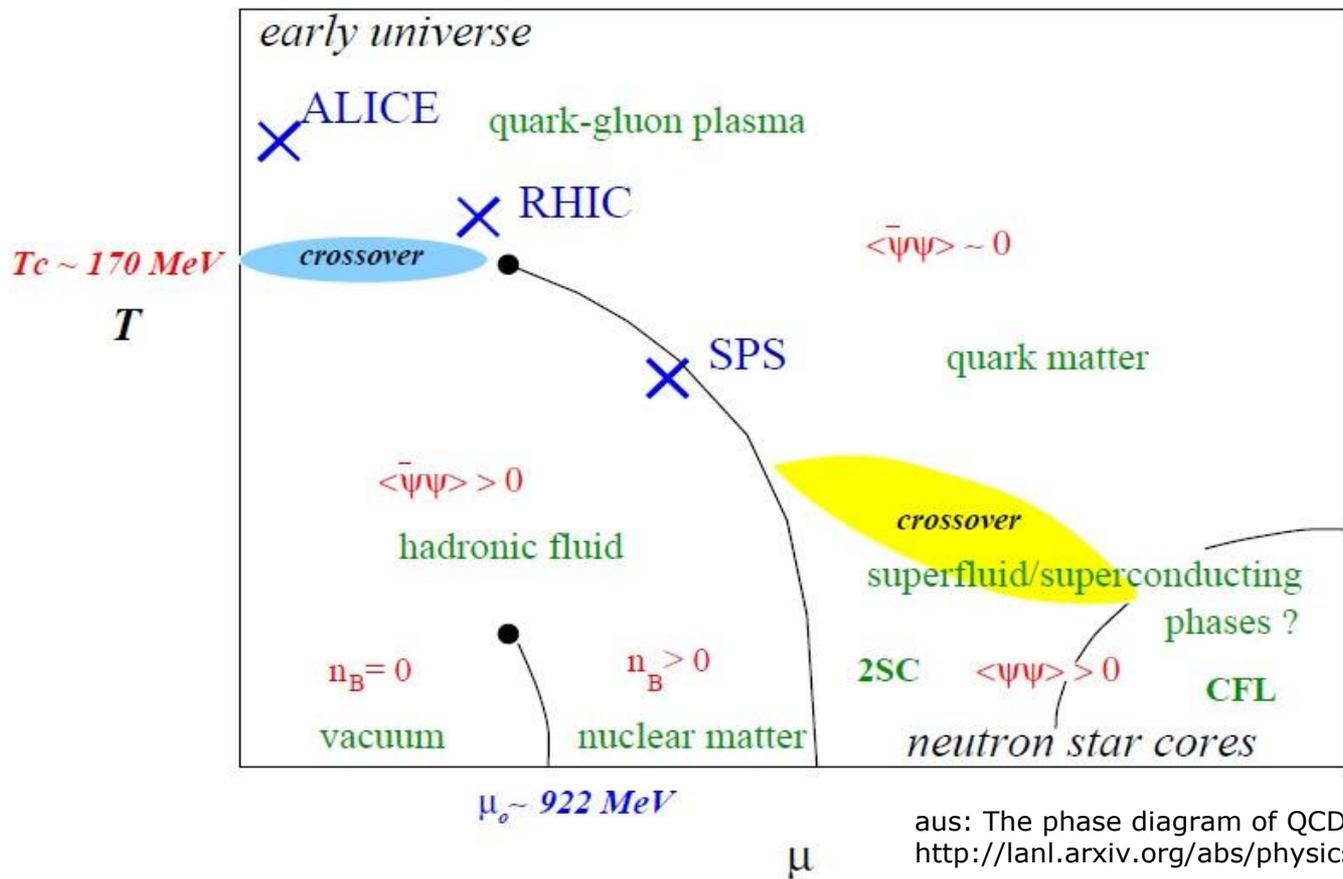
Das MIT – Bag – Modell

nicht-perturbatives
QCD-Vakuum



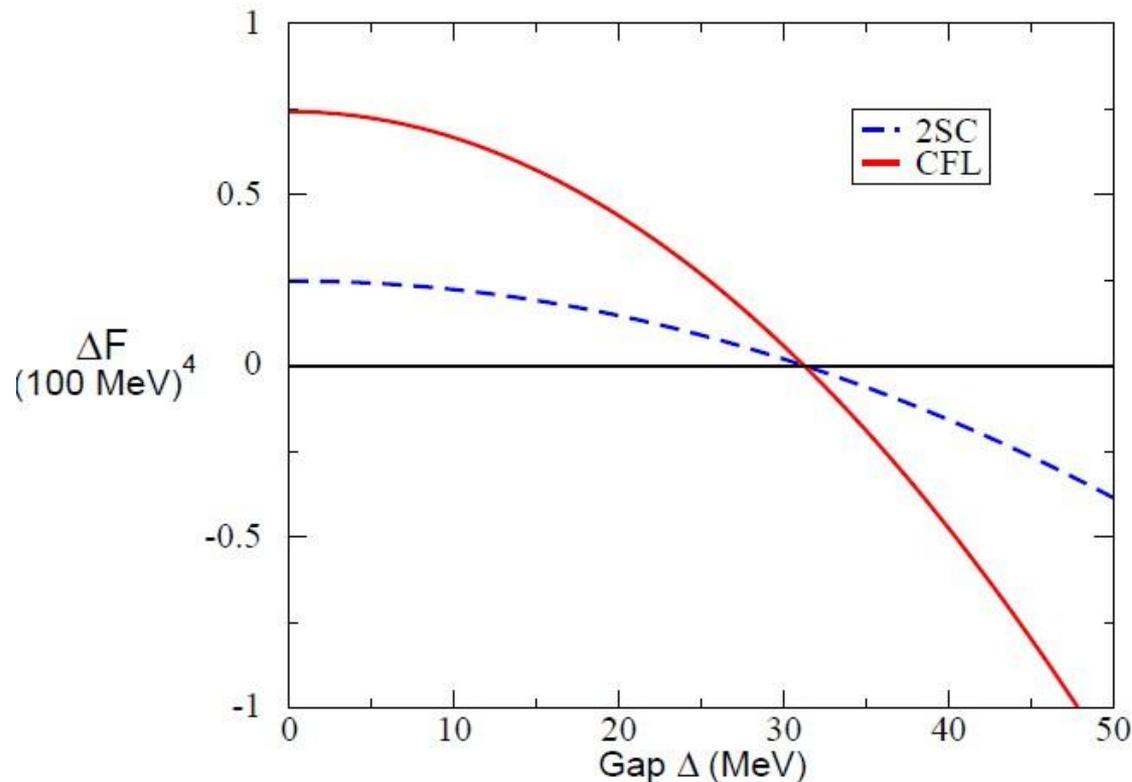
- freie q in endlichem Volumen
- Hadronen: „Taschen“ konstanter Energiedichte (Bag-Konstante B)
- $B \sim (200 \text{ MeV})^4$

Das QCD - Phasendiagramm



aus: The phase diagram of QCD; Simon Hands; <http://lanl.arxiv.org/abs/physics/0105022v1>

Vergleich CFL – 2CS (einfach)



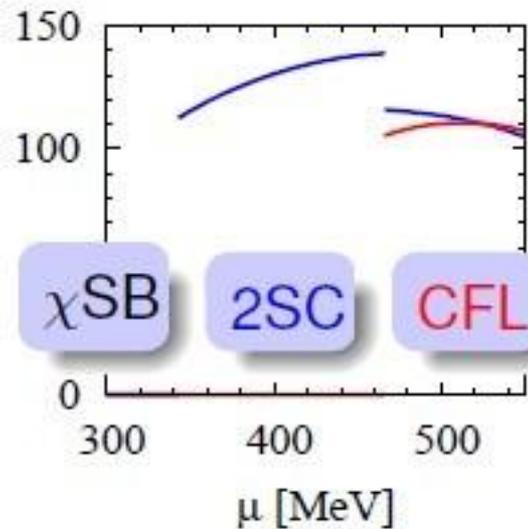
$\mu = 500 \text{ MeV}$

$M_S = 250 \text{ MeV}$

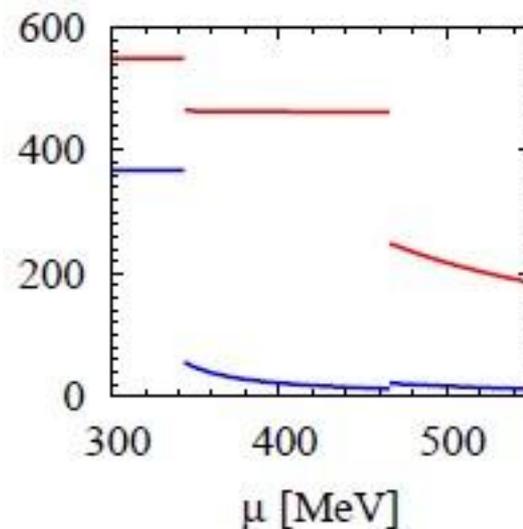
aus: Absence of two-flavor
color superconductivity in compact stars,
M. Alford/K. Rajagopal

Abhängigkeit Δ bzw. M_s von μ

$$\Delta_{ud}, \Delta_{us} = \Delta_{ds}$$

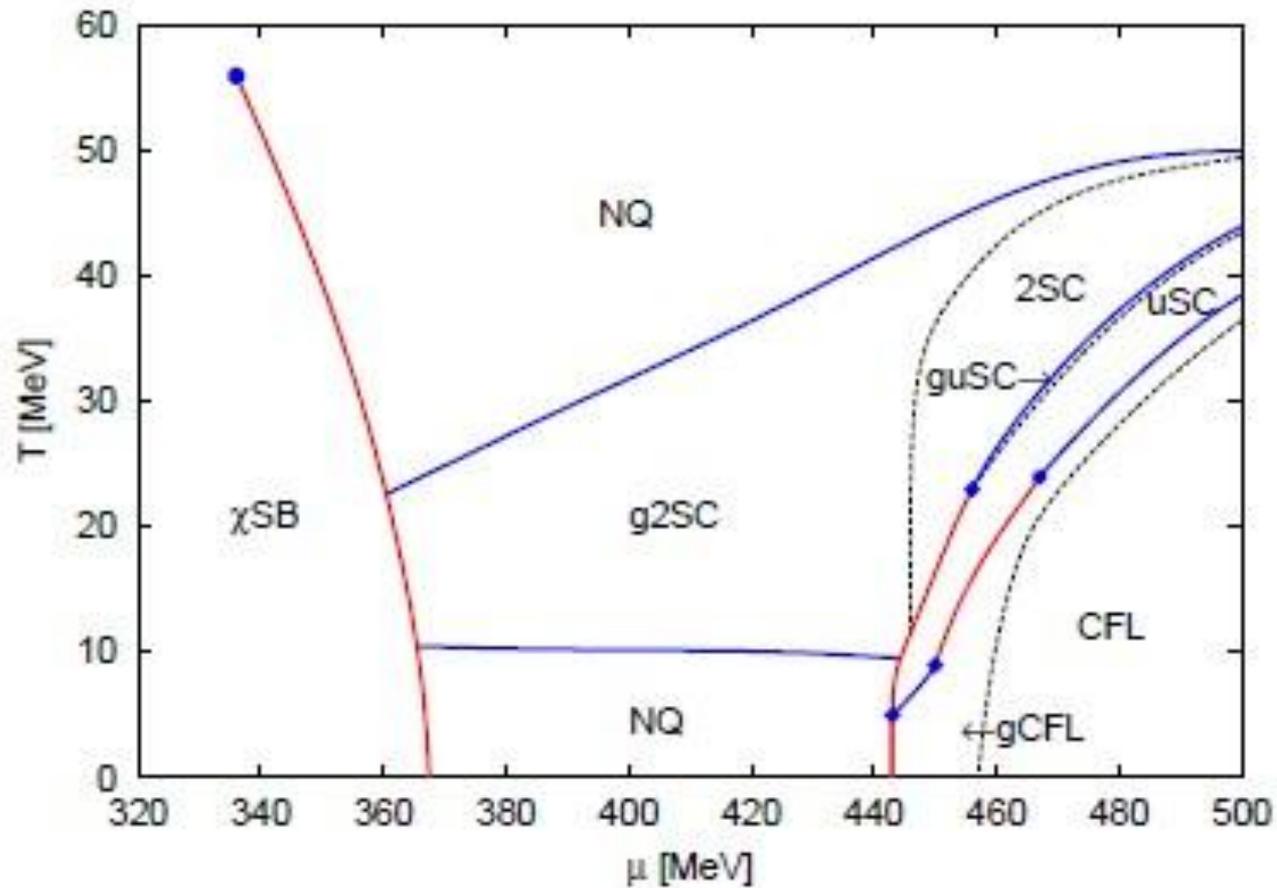


$$M_u = M_d, M_s$$



aus: The Complex Physics of Compact Stars - The inner core(QCD matter); M.Buballa, lecture at the 44th Karpacz Winter School

Ein etwas komplizierteres Phasendiagramm...



Wie finde man QM in NS?

- Supernova-Explosionen durch QM erklärbar
- Auswirkungen auf R-M-Verhältnis
- Cooling-Prozesse (Einfluß der spez. Wärme von QM)
- Einfluss auf sog. r-Moden in GW (abhängig Viskosität)
- Supernova-Neutrinos
- Pulsar glitches

Fazit:

- Phasenübergänge in NS-Kernen möglich und wahrscheinlich
- ABER: Schwer zu detektieren
- Dritte Familie von kompakten Objekten theoretisch existent
- Weitere Erforschung in vielen Bereichen (Supernovae, GW-Forschung, X-ray, Kolliderexperimente)



Vielen Dank für die
Aufmerksamkeit!

Neutronensterne und das QCD-Phasendiagramm

Margit Maly

4.12.2009

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Neutronensterne	2
3	Quark Materie und QCD-Phasenübergänge	2
3.1	Zusammenfassung QCD	2
3.2	Das QCD-Phasendiagramm	3
3.2.1	Ungepaarte Quark-Materie	4
3.2.2	Color-Flavor-Locking Phase	6
3.2.3	2SC Phase	7
3.2.4	Vergleich	7
4	Experimenteller Nachweis von QM in kompakten Objekten	8
5	Fazit	8
6	Literaturverzeichnis	9

1 Einleitung

Seitdem die theoretische Existenz von kompakten stellaren Objekten mit Dichten ähnlich von Atomkernen, den Neutronensternen, im Jahr 1933 vorgeschlagen wurde, beschäftigen diese ganze Generationen von Physikern. Nach der Entdeckung des ersten Neutronensternes im Form eines Pulsars 1967 von Hewish/Bell können die vorrausgesagten Eigenschaften immer besser überprüft werden. Durch die hohen Dichten dieser Sterne erwartet man im Zentrum einen möglichen Übergang von normaler hadronischer Materie zu sogenannter Quark Materie, ein Zustand freier Quarks mit teilweise erstaunlichen Eigenschaften.

2 Neutronensterne - Entstehung und Eigenschaften

Ein Neutronenstern ist der mögliche Überrest eines Stern mit $M > 8M_{\odot}$, der am Ende seiner Hauptreihenexistenz in einer Supernova explodiert. Dadurch kann im Kern der Gravitationskollaps nicht mehr durch den Strahlungsdruck aufgehalten werden. Bei Kernmassen von $1,44 - 2M_{\odot}$ ist der Gravitationsdruck so stark, dass der Kern immer stärker komprimiert wird. Durch inversen β -Zerfall (${}^A_Z X + e^- \rightarrow {}^A_{Z-1} X + \nu_e$) werden die Atomkerne immer neutronereicher und ab einer kritischen Dichte von etwa $4,3 \cdot 10^{11} \frac{g}{cm^3}$ fangen die Neutronen an, aus dem Kern „herauszutropfen“. Erst durch den Entartungsdruck der freien Neutronen kann der Gravitationskollaps gestoppt werden. Durch Neutrinoemission kühlt der Stern binnen kurzer Zeit auf 1 Mio Kelvin ab.

Da der Radius von Neutronensterne nur 12-15 km bei einer Masse von etwa $1,44 - 2M_{\odot}$ beträgt, findet man im Durchschnitt dort extrem hohe Dichten im Bereich von $\rho \approx 4 \cdot 10^9 \frac{g}{cm^3}$, was ungefähr der Atomkerndichte (ρ_{nuc}) entspricht, vor. Allerdings variiert die Dichte mit der Tiefe im Stern. Im Bereich der äußeren und inneren Kruste ist diese noch kleiner als ρ_{nuc} , im inneren Kern allerdings sind Werte von bis zu $10 \cdot \rho_{nuc}$ möglich. Auf Grund dieser Dichten ist hier der Übergang zu noch kompakterer Materie, der Quark-Materie, sehr wahrscheinlich. Die Beschreibung mit Hilfe einer Zustandsgleichung $P = P(\rho)$ hängt daher stark von der betrachteten Schicht und der darin vorhandenen Materie ab und ist bis heute noch nicht vollständig geklärt.

3 Quark Materie und QCD-Phasenübergänge

3.1 Zusammenfassung QCD

Die Quantenchromodynamik beschreibt die starke Wechselwirkung zwischen Quarks mit ihren Austauschteilchen, den Gluonen. Neben der elektromagnetischen Ladung haben Quarks auch noch eine sogenannte Farbladung (rot, grün, blau). Jedes Modell von aus Quark bestehender Materie hat 2 wichtige Prinzipien zu beachten. Zum einen die Tatsache, dass man bisher keine freien Quarks beobachtet hat, was als "confinement" bezeichnet wird. Zum anderen die asymptotische Freiheit von Quarks, die besagt, dass sich Quarks für kleine Abstände/große Impulse quasi wechselwirkungsfrei bewegen. Die starke Bindung der Quarks aneinander lässt sich auch gut an dem empirischen WW-Potential

$$V(r) = -\frac{A}{r} + kr$$

ablesen. Während für kleine Abstände r der erste (coulombartige) Term dominiert, so wird für große r der zweite Term linear in r bedeutend. Je weiter man zwei Quarks voneinander entfernt, desto mehr Energie steckt in dem Potential, bis diese die groß genug ist, ein Quark-Antiquark-Paar zu erzeugen. Somit erhält man letztendendes wieder zwei Mesonen.

Ein Modell, das gebundene Quarks anschaulich sehr gut beschreibt ist das MIT-Bag-Modell. Hierbei stellt man sich freie Quarks in einem endlichen Volumen eingesperrt vor. Dadurch werden Hadronen zu Art „Taschen“ mit konstanter Energiedichte, in denen ein perturbatives Vakuum vorherrscht. Die Begrenzung dieser Taschen, vorstellbar als eine Art externer Druck, welche die Hadronen zusammenhält, wird durch die Bag-Konstante B beschrieben. Modellrechnungen ergeben Werte von $B \sim (200 \text{ MeV})^4$.

3.2 Das QCD-Phasendiagramm

Wie in der klassischen Thermodynamik kann man auch in der QCD die Übergänge von verschiedenen Erscheinungsformen quarkhaltiger Materie ineinander qualitativ durch ein Phasendiagramm beschreiben (siehe Abb. 1). Die Kontrollparameter sind hier die Temperatur T und das baryonische chemische Potential μ . Für hohe Temperaturen und sehr kleine Dichten erhält

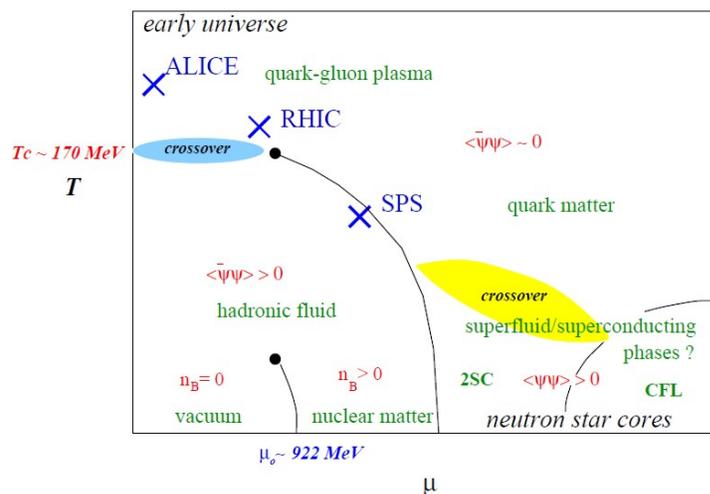


Abbildung 1: QCD-Phasendiagramm (aus [2])

man Zustände wie kurz nach dem Urknall, diverse eingezeichnete Experimente (LHC etc.) versuchen sich quantitativ diesem Regime zu nähern. Theoretisch lässt sich dieser Bereich für $\mu = 0$ relativ gut durch die Gitter-QCD beschreiben. Hier möchte ich allerdings speziell die $T=0$ Achse betrachten, da dies der für die Betrachtung von Neutronensternen relevante Bereich ist. Die Beschreibung dort geschieht vor allem durch das Bag-Modell.

Startet man bei kleinem μ , also kleinen Dichten, so befindet man sich zuerst im Bereich des Vakuums. Übersteigt die Energiedichte den Wert der Nukleonenrestmasse abzüglich der Bindungsenergie kommt es zu einem Phasenübergang in hadronisch gebundene Materie. Die Baryonenzahl als Ordnungsparameter steigt hier sprunghaft auf einen Wert über Null.

Mit Zunahme der Dichte nähern sich die „Hadrontaschen“ immer mehr und bei einer kritischen Dichte ρ_{crit} fangen die Taschen an sich zu überlappen und zu verschmelzen. Dies ist der Übergang vom confinement zum deconfinement, also von hadronischer Materie zu Materie, die aus freien Quarks besteht. Nimmt man vereinfach eine sphärische Form der Taschen an, so kann man die kritische Dichte in Abhängigkeit des Bag-Radius, also dem Nukleonenradius R_N ,

schreiben als

$$\rho_{crit} = \frac{3}{4\pi R_N^3}.$$

Der prinzipielle Verlauf des Übergangs von hadronischer zu Quark-Materie erhält man, indem man die Energiedichte ϵ und den Druck von freien Quarks und Gluonen berechnet und letzteren gleich der Bag-Konstante B setzt. Damit ist zwar die generelle Form gut beschrieben, aber quantitativ müsste man die Wechselwirkungen und die endlichen Massen der Quarks berücksichtigen. Die Beschreibung dieses Phasenübergangs ist daher stark modellabhängig und noch lange nicht vollständig erforscht.

Doch auch innerhalb der Quarkmaterie kommt es noch zu Phasenübergängen. Durch die hohen Dichten in der Quarkphase hat man Fermioberflächen von fast freien Quarks. Das BCS-Theorem besagt nun, dass wenn nun irgendeine anziehende WW vorliegt (was hier durch das Quark-WW-Potential gut gegeben ist), sich farbsuperleitende Cooper-Paare von Quarks bilden können und damit der Zustand der tiefsten Energie als Fermifläche bevorzugt wird. Diese Paarbildung setzt also ein, wenn die Bindungsenergie größer ist als die Energie, welche zur Paarbildung benötigt wird. Die Größe der Energielücke Δ bestimmt also, welche Form von Materie vorliegt.

Im Folgenden berechne ich die freie Energie der ungepaarten und zwei möglicher gepaarten Phasen, um Bedingungen für den Übergang der einen zur anderen aufzustellen.

Hierbei ist μ das baryonisch chemische Potential und M_s die Konstituentenmasse des Strange-Quarks. Zudem muss man noch ein paar Annahmen in die Berechnung eingehen lassen:

1. Nur u,d und s Quarks vorhanden (da Energie/Dichte für die Erzeugung schwerer Quarks nicht ausreicht)
2. $M_u = M_d = 0$ und $M_s > m_s$
3. $\mu \gg M_s$
4. Neutronestern abgekühlt $\Rightarrow T = 0$ und neutrinotransparent
5. Relevante Symmetrien: Farbe, Elektromagnetismus, Baryonenzahlerhaltung
6. Materie soll im großen farbneutral sein: Betrachtung der Untergruppen $T_3 = \text{diag}(1/2, -1/2, 0)$ und $T_8 = \text{diag}(1/3, 1/3, -2/3)$ im Farbraum (r,g,b) mit der Forderung das chemische Farbpotentiale μ_3, μ_8 so gewählt werden, dass T_3, T_8 verschwinden
7. Elektromagnetismus durch $Q = \text{diag}(2/3, -1/3, 1/3)$ mit em-chem. Potential μ_e in (u,d,s) gegeben
8. Rechnungen in $\mathcal{O}\left(\left(\frac{M_s}{\mu}\right)^4\right)$
9. Zusätzlich: $\mu \approx 500 \text{ MeV}$; $120 \text{ MeV} < M_s < 500 \text{ MeV}$

3.2.1 Ungepaarte Quark-Materie

Zuerst betrachten wir den Zustand von ungepaarten Quarks. Um die Farbneutralität zu gewährleisten reicht es aus μ_3 und μ_8 Null zu setzen.

Weiterhin fordert man, dass sich die Materie im Beta-Gleichgewicht befindet:

$$d(\text{bzw. } s) \leftrightarrow u + e^- (+\bar{\nu}_e)$$

Also gleichbedeutend mit

$$\mu_s = \mu_d = \mu_u + \mu_e$$

Um zudem elektrisch neutrale Materie zu erhalten, setzt man

$$\mu_Q = \frac{2}{3}\mu_u - \frac{1}{3}\mu_d - \frac{1}{3}\mu_s - \mu_e = 0$$

Mit $\mu = \frac{1}{3}(\mu_u + \mu_d + \mu_s)$ erhält man folgende Bedingungen:

$$\begin{aligned}\mu_u &= \mu - \mu_e \\ \mu_d &= \mu + \mu_e \\ \mu_s &= \mu + \mu_e\end{aligned}\tag{1}$$

Unter der Annahme, dass der Fermisee bis zum Fermiimpuls p_F gefüllt ist, d.h. dieser bei u- und d-Quark dem chem. Potential entspricht und $p_F^s = \sqrt{\mu_s^2 - M_s^2}$ ist, lässt sich die freie Energie Ω_{un} folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned}\Omega_{un}(\mu, \mu_e, M_s) &= \frac{3}{\pi^2} \int_0^{p_F^u} (p - \mu_u) p^2 dp + \frac{3}{\pi^2} \int_0^{p_F^d} (p - \mu_d) p^2 dp + \\ &\quad \frac{3}{\pi^2} \int_0^{p_F^s} (\sqrt{p^2 + M_s^2} - \mu_s) p^2 dp + \\ &\quad \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\mu_e} (p - \mu_u) p^2 dp\end{aligned}\tag{2}$$

Das elektrisch-chemische Potential μ_e fixiert man durch die Neutralitätsbedingung

$$\frac{d\Omega_{un}}{d\mu_e} = 0$$

und erhält somit (in niedrigster Ordnung)

$$\mu_e = \frac{M_s^2}{4\mu}.$$

Mit Hilfe dieser Bedingung lässt sich μ_e eliminieren und man erhält für die Fermiimpulse von den 3 Quarks:

$$\begin{aligned}p_F^d &= \mu + \frac{M_s^2}{12\mu} = p_F^u + \frac{M_s^2}{4\mu} \\ p_F^u &= \mu - \frac{M_s^2}{6\mu} \\ p_F^s &= \mu - \frac{5M_s^2}{12\mu} = p_F^u - \frac{M_s^2}{4\mu}\end{aligned}\tag{3}$$

Führt man nun die Integration in (2) aus so erhält man unter Verwendung des Zusammenhangs (3) einen Ausdruck für die freie Energie von neutraler, ungepaarter Quarkmaterie, der nur noch von den freien Parametern μ und M_s abhängt:

$$\Omega_{un}^{neutral} = -\frac{3\mu^2}{4\pi^2} + \frac{3M_s^2\mu^2}{4\pi^2} - \frac{7 - 12 \ln(M_s/2\mu)}{32\pi^2} \cdot M_s^4\tag{4}$$

Betrachtet man (4) so verschwindet der elektrische Beitrag, da er in $\mathcal{O}(\mu_e^4)$ eingeht. Weiterhin wurde hier auf die Einführung einer Bag-Konstante und eventueller Wechselwirkungen verzichtet, da diese nur relevant bei Übergängen von hadronischer zu Quark-Materie wird und bei Zuständen innerhalb der QM keine Rolle spielt.

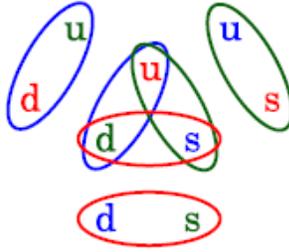
Betrachtet man nun den Zusammenhang zwischen den Fermiimpulsen der jeweiligen Quark-flavours (3) so sieht man, wie p_F^d durch die Konstituentenmasse des Strangequarks erhöht, bzw. p_F^s relativ zu p_F^u verringert wird. Diese Angleichungen verursachen später die Möglichkeit der CFL-Paarbildung.

3.2.2 Color-Flavor-Locking Phase

In dieser Phase sind alle drei Quarks (u,d,s) an der Paarbildung beteiligt. Dies ist für hohe Dichten möglich, wenn die Energie ausreicht, die Fermiimpulse ähnlich groß werden zu lassen. Betrachtet man das Skalarprodukt zweier Quarks, so erhält man:

$$\langle q_a^\alpha q_b^\beta \rangle \sim \Delta \sum_{i=1}^3 \epsilon^{\alpha\beta i} \epsilon_{abi}$$

wobei $\alpha, \beta = r, g, b$ und $a, b = u, d, s$. Dies führt zu den folgenden Möglichkeiten:



Um nun die freie Energie der CFL-Phase zu berechnen, betrachtet man die Energie von ungepaarten Quarks, allerdings mit der Annahme, dass alle Quarks, die Paare bilden können, den gleichen Fermiimpuls p_F^{com} (pro Paarmöglichkeit) haben und dieser die freie Energie minimiert. Zudem muss man noch die Bindungsenergie des 2Q-Kondensats abziehen. Diese ist i.A gegeben durch die Zustanddichte $k^2 dk$ multipliziert mit der Energielücke Δ , in unserem Fall ergibt sich somit $\frac{\Delta^2 \mu^2}{4\pi^2}$. Man macht also für die freie Energie der CFL-Phase folgenden Ansatz:

$$\Omega_{CFL} = \frac{1}{\pi^2} \sum_{i=1}^9 \int_0^{p_{F,i}^{com}} (\sqrt{p^2 + M_i^2} - \mu_i) p^2 dp - \frac{3}{\pi^2} \Delta^2 \mu^2 \quad (5)$$

mit $M_i = 0$ für u,d und $\mu_i = \mu - Q\mu_e + T_3\mu_3 + T_8\mu_8$.

Minimiert man Ω_{CFL} nun für die jeweiligen $p_{F,i}^{com}$ so erhält man diese für die 4 möglichen Paarungen in Abhängigkeit von μ, μ_e, μ_3, μ_8 und M_s . Die Impulse implizieren, dass es sich nun um rein fiktionale ungepaarte Quarkmaterie handelt, da sowohl keine scharfte Fermikante mehr vorhanden ist, als auch die Anzahldichte nicht mehr $\sim (p_F^{com})^3$ ist.

Führt man nun die Integration in (5) und fordert wiederum ladungs- und farbneutrale Materie

$$\frac{d\Omega_{CFL}}{d\mu_e} = 0 \quad \frac{d\Omega_{CFL}}{d\mu_3} = 0 \quad \frac{d\Omega_{CFL}}{d\mu_8} = 0$$

so erhält man Bedingungen an μ_e, μ_3, μ_8 . Eingesetzt in (5) ergibt sich die freie Energie von der neutralen CFL-Phase in Abhängigkeit von μ und M_s als

$$\Omega_{CFL}^{neutral} = -\frac{3\mu^2}{4\pi^2} + \frac{3M_s^2\mu^2}{4\pi^2} - \frac{1 - 12 \ln(M_s/2\mu)}{32\pi^2} \cdot M_s^4 - \frac{3}{\pi^2} \Delta^2 \mu^2 \quad (6)$$

Um nun eine Aussage darüber treffen zu können, wann die CFL-Phase der ungepaarte energetisch bevorzugt wird, hat man zu schauen, wann $\Omega_{CFL}^{neutral} < \Omega_{un}^{neutral}$ gilt. Hierfür muss die WW stark genug sein, dass

$$\Delta > \frac{M_s}{4\mu} \quad (7)$$

erfüllt ist.

Δ ist dementsprechend in der Größenordnung von 10-100 MeV. Es ist daher sehr wahrscheinlich, dass eine derartige Phase in dichten Neutronensternkernen vorherrschen kann.

3.2.3 2SC Phase

Eine weitere Möglichkeit zur Paarbildung in Quark Materie, ist die 2SC-Phase in der nur u- und d-Quarks koppeln. Diese tritt auf, wenn die Fermiimpulse von u und d etwa gleich sind und beide wesentlich größer als der des s-Quarks. Dies ist bei etwas geringeren Dichten, als bei der CFL-Paarung nötig sind, der Fall. Dieses Quarkkondensat ist gegeben durch

$$\langle q_a^\alpha q_b^\beta \rangle \sim \Delta \epsilon^{\alpha\beta 3} \epsilon_{ab3}$$

Es bilden sich also die Paare (rd, gu) und (ru, gd).

Mit einem ähnlichen Ansatz wie bei der CFL-Phase kann man auch hier die freie Energie berechnen und erhält:

$$\Omega_{2SC}^{neutral} = \Omega_{un}^{neutral} + \frac{M_s^4 - 16\Delta^2\mu^2}{16\pi^2} \quad (8)$$

3.2.4 Vergleich

Betrachtet man nun die ungepaarte, CFL und 2SC Phase im Vergleich (siehe Abb.2), so sieht man dass die 2SC-Phase immer unterdrückt wäre. Allerdings haben wir angenommen, dass

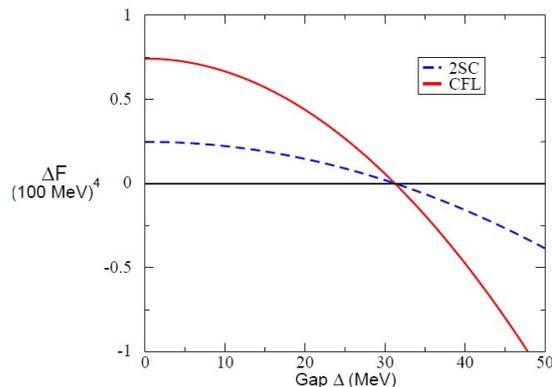


Abbildung 2: Energien relativ zu Ω_{un}

sowohl Δ als auch M_s gleich für alle Phasen und μ sind. Modellrechnungen allerdings zeigen, dass zum einen Δ in der CFL-Phase um einen Faktor 0,8 kleiner ist, als in der 2SC, zum anderen dass die Konstituentenmasse der Quarks stark abhängig von μ ist (siehe Abb.3). Somit wäre je nach Modellparametern auch die 2SC-Phase in kompakter Sternmaterie vorfindbar.

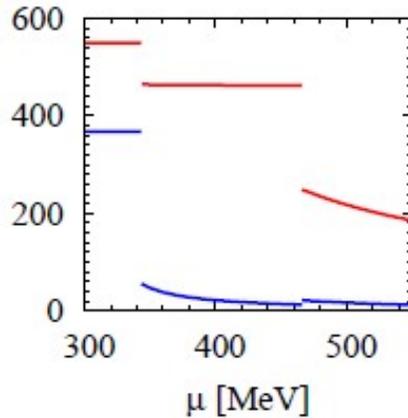


Abbildung 3: Quarkmassen (blau:u,d ; rot:s) abhängig von μ

4 Experimenteller Nachweis von QM in kompakten Objekten

Das Vorhandensein von (un-)gepaarte Quarkmaterie in Neutronesternern könnte sich auf verschiedene Weisen zeigen.

Zum einen hätte eine farbsuperleitende, kompakte Materie Auswirkungen auf die Zustandsgleichung und damit auf das Masse-Radius-Verhältnis, dies allerdings nur zu einem relativ kleinen Anteil. Weiterhin zeigen heutige Simulation von Supernovae Eigenschaften, die sich so nicht durch hadronische Materie allein erklären lassen können.

Der Einfluss einer Quarkphase auf die spezifische Wärme könnte sich in den Abkühlprozessen zeigen, da dieser zu schnell verläuft, wenn man nur von normaler Materie ausgeht.

Auch die veränderte Viskosität im Kern beeinflusst die sog. r-Moden in Gravitationswellen und dient daher auch als möglicher Nachweis. Auch schnelle Änderungen in der Rotation von Pulsaren sind ein möglicher Indikator.

5 Fazit

Obwohl man durch relativ simple Annahmen und Rechnungen zeigen kann, dass farbsuperleitende Phasen in kompakten Sternen möglich und auch wahrscheinlich sind, ist es leider weiterhin schwer einen direkten Nachweis dafür zu erbringen. Da die meistens uns zugänglichen Informationen von Neutronensternen aus der Hülle stammen (in der größtenteils normale atomare Materie vorliegt), ist man auf indirekte und zudem heute noch modellabhängige Nachweise angewiesen. Daher handelt es sich hierbei um ein aktuelles Forschungsfeld der Physik, das noch lange nicht abgeschlossen ist.

6 Literaturverzeichnis

Literatur

- [1] Absence of two-flavor color-superconductivity in compact stars; M.Alford, K.Rajagopal; <http://arxiv.org/abs/hep-ph/0204001v2>
- [2] The Phase Diagram of QCD; S.Hands <http://lanl.arxiv.org/abs/physics/0105022v1>
- [3] The Complex Physics of Compact Stars - The inner core(QCD matter); M.Buballa, lecture at the 44th Karpacz Winter School
- [4] Black holes, white dwarfs and neutron stars; S. Shapiro, S. Teukolsky; John Wiley&sons Inc, 1983
- [5] Quark-Gluon Plasma; K. Yagi et al.; Cambridge University Press, Cambridge 2005
- [6] The structure of neutron stars; Talk by J.Schaffner-Bielich, Heidelberg 2008
- [7] QCD at high density/temperature; M.Alford <http://arxiv.org/abs/hep-ph/0209287v1>
- [8] Phase Transitions In Compact Stars; J.Macher, J.Schaffner-Bielich <http://arxiv.org/abs/astro-ph/0411295v2>
- [9] Compact Stars for Undergraduates; I.Sagert,M.Hempel, C.Greiner, J.Schaffner-Bielich <http://arxiv.org/abs/astro-ph/0506417v1>
- [10] <http://www.mpa-garching.mpg.de/lectures/WDNSBH/wdnsbh-4.pdf>
- [11] http://www.kvi.nl/~loehner/saf_seminar/2008/TheQuarkAndBagModels.ppt
- [12] http://en.wikipedia.org/wiki/Neutron_star