7. Kritische Exponenten, Skalenhypothese

7.1 Kritische Exponenten, Universalitätsklassen

allgemeine Beobachtung:
physikalische Größen verhalten sich in der Nähe des kritischen Punktes gemäß einem Potenzgesetz

$$|T - T_c|^{\pm\lambda} \sim \tau^{\pm\lambda}$$

die λ heißen kritische Exponenten und werden als positiv angenommen

das Vorzeichen in dieser Relation gibt an, ob die jeweilige physikalische Größe gegen null geht (positives Vorzeichen) oder divergiert (negatives Vorzeichen)

Ausnahmen zu diesem Verhalten (werden mit $\lambda \equiv 0$ bezeichnet):

- logarithmische Divergenz
- Unstetigkeiten (endl.)

effektive kritische Exponenten

$$f(T) \sim |\tau|^{\lambda} \Longleftrightarrow \lambda = \lim_{\tau \to 0} \frac{\ln|f(\tau)|}{\ln|\tau|}$$

Zusammenfassung von Systemen mit gleichen Sätzen von kritischen Exponenten zu Universalitätsklassen

Übersicht über die gängigsten kritischen Exponenten:

magnetische Systeme	$\tau > 0$	$\tau < 0$
spezifische Wärme ($H = 0$)	$C_H \sim \tau^{-\alpha}$	$C_H \sim (-\tau)^{-\alpha'}$
Magnetisierung ($H = 0$)		$M \sim (-\tau)^{\beta}$
isotherme Suszeptibilität ($H = 0$)	$\chi_{\mathrm{T}} \sim \tau^{-\gamma}$	$\chi_{\mathrm{T}} \sim (-\tau)^{-\gamma'}$
Relation zwischen H und M für $T = T_c$	$H \sim \|M\|^{\delta}\mathrm{sgn}(M)$	
Korrelationslänge	$\xi \sim \tau^{-\nu}$	$\xi \sim (-\tau)^{-\nu'}$
Korrelationsfunktion	$\Gamma(\mathbf{r}) \sim 1/r^{D-2+\eta}$	

Flüssigkeiten	$\tau > 0$	$\tau < 0$
spezifische Wärme ($V =$ const.)	$C_V \sim \tau^{-\alpha}$	$C_V \sim (-\tau)^{-\alpha'}$
Dichtedifferenz ($\rho_{\mathrm{fl}} - \rho_{\mathrm{g}}$)		$(\rho_{\mathrm{fl}} - \rho_{\mathrm{g}}) \sim (-\tau)^{\beta}$
isotherme Kompressibilität	$\kappa_{\mathrm{T}} \sim \tau^{-\gamma}$	$\kappa_{\mathrm{T}} \sim (-\tau)^{-\gamma'}$
Relation zwischen P und ϱ für $T = T_c$	$(P - P_c) \sim \|\rho_{\mathrm{fl}} - \rho_{\mathrm{g}}\|^{\delta}\mathrm{sgn}(\rho_{\mathrm{fl}} - \rho_{\mathrm{g}})$	
Korrelationslänge	$\xi \sim \tau^{-\nu}$	$\xi \sim (-\tau)^{-\nu'}$
Korrelationsfunktion	$\Gamma(\mathbf{r}) \sim 1/r^{D-2+\eta}$	

Beispiele für die Werte der kritischen Exponenten für die gängigsten Universalitätsklassen:

Universalitätsklasse	α	β	γ	δ	ν	η
Molekularfeldnäherung	0 (disk.)	1/2	1	3	1/2	0
Ising (2D)	0 (log.)	1/8	7/4	15	1	1/4
Ising (3D)	0.10	0.33	1.24	4.8	0.63	0.04
Potts (2D, $q = 3$)	1/3	1/9	13/9	14	5/6	4/15
Potts (2D, $q = 4$)	2/3	1/12	7/6	15	2/3	1/4

7.2 Beziehungen zwischen den kritischen Exponenten

Beispiel: magnetisches System, $H = 0$, $T \to T_c^-$

es gilt exakt (vgl. Kapitel 3)

$$\chi_T (C_H - C_M) = T \alpha_H^2$$

in der Nähe des kritischen Punktes gilt:

- $C_H \sim (-\tau)^{-\alpha'}$
- $\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H \sim (-\tau)^{\beta - 1}$ (da $M \sim \tau^\beta$)
- $\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T \sim (-\tau)^{-\gamma'}$

unter gewissen Voraussetzungen sind $C_H > 0$ und $C_M > 0$; daraus folgt:

$$\underbrace{C_H}_{\sim(-\tau)^{-\alpha'}} > T \underbrace{\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H^2}_{(-\tau)^{2(\beta-1)}} \underbrace{\frac{1}{\chi_T}}_{(-\tau)^{-(-\gamma')}}$$

mit dem Lemma

$$\boxed{\left.\begin{array}{l} f(x) \sim x^{\mu} \\ g(x) \sim x^{\nu} \end{array}\right\} \begin{array}{l} f(x) \leq g(x) \\ \Rightarrow \forall \text{ hinreichend kleinen } x \text{ gilt } \mu > \nu \end{array}}$$

folgt schließlich

$$-\alpha' \leq 2(\beta - 1) - (-\gamma') \quad \text{bzw.} \quad \alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \quad (\text{Rushbrook; ca.}1960)$$

weitere, ähnliche Ungleichungen:

- Griffith (1965 $\sim$ 1968)

$$\alpha' + \beta(\delta + 1) \geq 2$$

$$\gamma(\delta + 1) \geq (2 - \alpha)(\delta - 1)$$

$$\gamma' \geq \beta(\delta - 1)$$

- Buckingham-Gunton ($\sim$ 1969)
- Fisher ($\sim$ 1969)
- Josephson

$$d\nu^{(')} \geq 2 - \alpha^{(')}$$

Bemerkungen:

- ist die Dimension d in diese Relationen involviert, so spricht man von “hyper”-Relationen
- oft werden die Ungleichungen als Gleichungen mit hoher Genauigkeit erfüllt $\Rightarrow$ Skalenhypothese, Renormierungsgruppentheorie
- Relationen sind experimentell oft schwer verifizierbar

7.3 Skalenhypothese für die thermodynamischen Potentiale

Skalenhypothese für die thermodynamischen Potentiale wurde als als *ad hoc* Annahme eingeführt (Widom, ca. 1965; weitere Beiträge von Domb und Hunter, ca. 1965)

wurden in der Hoffnung eingeführt, daß sich Zustandsgleichung in der Nähe des kritischen Punktes vereinfacht

grundlegende Idee:

- Skalenhypothese wird für $G(T, H)$ angenommen;
  gilt die Skalenhypothese für G, so gilt sie für alle Potentiale (ohne Beweis)
- alle nicht-singulären Terme in den thermodynamischen Potentialen werden nicht berücksichtigt
- $\tau = \frac{T - T_c}{T_c}$ sei klein

Behauptung:
$G(T, H)$ ist eine verallgemeinerte homogene Funktion in τ und H, d.h.,

$$G(\lambda^{a_\tau}\tau, \lambda^{a_H}H) = \lambda G(\tau, H) \qquad \text{fuer alle } \lambda$$

mit (vorerst unbestimmten) Parametern a_τ und a_H

Frage: was sind die Konsequenzen für

(a) die kritische Exponenten

(b) die Zustandsgleichung

(a) kritische Exponenten

$$\frac{\partial}{\partial H}\left[G(\lambda^{a_\tau}\tau, \lambda^{a_H}H)\right] = \lambda^{a_H}\frac{\partial}{\partial(\lambda^{a_H}H)}\left[G(\lambda^{a_\tau}\tau, \lambda^{a_H}H)\right] = \lambda\frac{\partial}{\partial H}\left[G(\tau, H)\right]$$

mit $M = -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_T$ gilt daher:

$$\lambda^{a_H}M(\lambda^{a_\tau}\tau, \lambda^{a_H}H) = \lambda M(\tau, H) \tag{7.1}$$

auf dieser Relation aufbauend werden folgende Fälle betrachtet:

(i) $H = 0, \tau \to 0$: hier gilt $M \sim (-\tau)^\beta$
in Gleichung (7.1),

$$\lambda^{a_H - 1}M(\lambda^{a_\tau}\tau, H = 0) = M(\tau, H = 0)$$

wird nun $\lambda = \left(-\frac{1}{\tau}\right)^{\frac{1}{a_\tau}}$ gesetzt; somit folgt für $\tau \to 0^-$:

$$\left.\begin{array}{rcl} \left(-\frac{1}{\tau}\right)^{\frac{a_H - 1}{a_\tau}} M(-1, 0) & = & M(\tau, 0) \\ (-\tau)^\beta & \sim & M(\tau, 0) \end{array}\right\} \Rightarrow \left(-\frac{1}{\tau}\right)^{\frac{a_H - 1}{a_\tau}} M(-1, 0) \sim (-\tau)^\beta$$

also

$$(1 - a_H) = a_\tau\beta \tag{7.2}$$

(ii) $H \to 0, \tau = 0$: hier gilt $H \sim |M|^{\delta} \mathrm{sgn}(M)$
in Gleichung (7.1),

$$\lambda^{a_H - 1} M(\tau = 0, \lambda^{a_H} H) = M(\tau = 0, H)$$

wird nun $\lambda = H^{-\frac{1}{a_H}}$ gesetzt; somit folgt nach einigen trivialen Zwischenschritten:

$$\delta = \frac{a_H}{(1 - a_H)} \tag{7.3}$$

aus Gleichungen (7.2) und (7.3) folgt somit

$$a_\tau = \frac{1}{\beta} \frac{1}{\delta + 1} \qquad a_H = \delta \frac{1}{\delta + 1} \tag{7.4}$$

(iii) $\chi_T(\tau \to 0^-, 0) \sim (-\tau)^{-\gamma'}$ und $\chi_T(-\tau \to 0^+, 0) \sim \tau^{-\gamma}$ mit $\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}\right)_T = -\chi_T$
aus Gleichung (7.1) folgt mit $\lambda = \left(-\frac{1}{\tau}\right)^{-\frac{1}{a_\tau}}$ nach einigen trivialen Zwischenschritten und für $\tau \to 0^-$:

$$\gamma' = \frac{2a_H - 1}{a_\tau}$$

und mit Gleichungen (7.4)

$$\gamma' = \beta(\delta - 1) \qquad \text{Widom Gleichung} \quad \text{(vgl. Griffith Ungleichung)}$$

analog folgt mit $\lambda = \left(\frac{1}{\tau}\right)^{-\frac{1}{a_\tau}}$ und $\tau \to 0^+$ nach einigen trivialen Zwischenschritten:

$$\gamma = \frac{2a_H - 1}{a_\tau} \qquad \text{also} \qquad \gamma = \gamma'$$

(iv) $C_H(\tau \to 0^-, 0) \sim (-\tau)^{-\alpha'}$ und $C_H(-\tau \to 0^+, 0) \sim \tau^{-\alpha}$ mit $\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_H \propto C_H$ analoge Schritte wie oben führen zu:

$$\begin{aligned} \alpha' + \beta(\delta + 1) &= 2 \quad \text{vgl. Griffith Ungleichung} \\ \alpha' + 2\beta + \gamma' &= 2 \quad \text{vgl. Rushbrooke Ungleichung} \end{aligned}$$

Zusammenfassung:

Skalenhypothese bewirkt, daß

(1) Ungleichungen zwischen den kritischen Exponenten zu Gleichungen werden ($\rightarrow$ Skalengesetze, Hyperskalengesetze)

(2) ungestrichene kritische Exponenten gleich gestrichenen kritischen Exponeten sind

beide Tatsachen entsprechen mit hoher Genauigkeit der experimentellen Situation

(b) Zustandsgleichung

aus Gleichung (7.1),
$$M(\tau, H) = \lambda^{a_H - 1} M(\lambda^{a_\tau}\tau, \lambda^{a_H} H)$$

folgt mit der Wahl $\lambda = |\tau|^{-\frac{1}{a_\tau}}$

$$M(\tau, H) = |\tau|^{\frac{(1-a_H)}{a_\tau}} M\left(\frac{\tau}{|\tau|}, \frac{H}{|\tau|^{a_H/a_\tau}}\right)$$

mit $(1 - a_H) = a_\tau \beta$ und $\delta = a_H/(1 - a_H)$ – vgl. Gleichungen (7.2) und (7.3) erhält man
$$\frac{M(\tau, H)}{|\tau|^\beta} = M\left(\pm 1, \frac{H}{|\tau|^{\beta\delta}}\right)$$

wobei $\beta\delta$ als "gap exponent" bezeichnet wird

führt man nun die Skalenfelder ("scaled magnetization" $\tilde{M}$ und "scaled magnetic field" $\tilde{H}$) über folgende Relationen ein,

$$\tilde{M} = \frac{M(\tau, H)}{|\tau|^\beta} \qquad \tilde{H} = \frac{H}{|\tau|^{\beta\delta}}$$

so erhält man folgende Form der Zustandsgleichung

$$\tilde{M} = \tilde{M}(\pm 1, \tilde{H})$$

bzw.

$$\tilde{M} = \Psi_{\pm}(\tilde{H}) \qquad \qquad \tilde{H} = (\Psi_{\pm})^{-1}(\tilde{M})$$

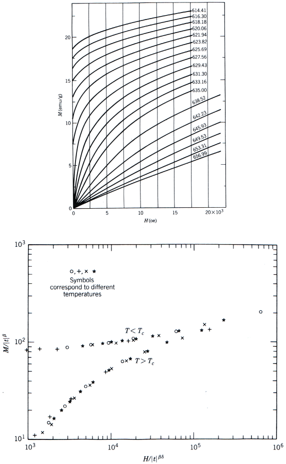
- durch diese Transformation wurde die Temperatur 'wegskaliert'; sie ist aber implizit in $\tilde{H}$ und $\tilde{M}$ enthalten
- die Funktionen $\Psi_{\pm}(x)$ heißen Skalenfunktionen; sie sind (wie die kritischen Exponenten) universell;
  es gilt (ohne Beweis):
  $\lim_{x \to 0} \Psi_{+}(x) = 0$
  $\lim_{x \to \infty} \Psi_{+}(x) = \lim_{x \to \infty} \Psi_{-}(x)$

offene Fragen:

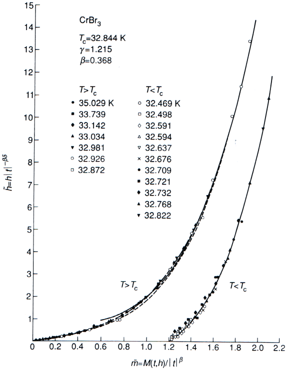
- Skalentheorie (Skalenhypothese) in einem breiteren Kontext sehen
- es fehlt eine Erklärung, warum sie funktioniert
- ist die explizite Berechnung der Skalenfunktionen und der kritischen Exponenten möglich?

Antworten führen zur Renormierungsgruppentheorie

Experimente zur Skalenhypothese nach Widom



Magnetische Zustandsgleichung von Ni: (a) M vs. H (oben); (b) $\tilde{M}$ vs. $\tilde{H}$ (unten). Experimentelle Ergebnisse aus 1926 (!); aus Ref. [7.1]



Magnetische Zustandsgleichung von $CrBr_3$: $\tilde{M}$ vs. $\tilde{H}$; aus Ref. [7.2], nach Ref. [7.3]

Literatur

7.1 K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley (New York, 1987), 2. Auflage.

7.2 J.M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Clarendon Press (Oxford, 1992).

7.3 J.T. Ho and J.D. Lister, Phys. Rev. Lett. **22**, 603 (1969).