

Pfadintegraldarstellung der kanonischen Zustandssumme

Victor Kärcher

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Begriffe aus der statistischen Physik	3
2.1	Statistisches Ensemble	3
2.2	Phasenübergänge	4
2.3	Kritische Exponenten	5
2.4	Ising-Modell	5
3	Pfadintegrale	6
4	Ising-Modell und Pfadintegrale	7
4.1	Berechnung der Zustandsumme	7
5	Freie Theorie	8
6	Berechnung von χ	10
7	Literaturverzeichnis	11

1 Einleitung

Schon seit der Antike, insbesondere nach Begründung der Naturphilosophie, fragten sich die Menschen wodurch die vier Elemente: Feuer, Erde, Wasser und Luft entstehen und unter welchen Bedingungen sich diese ineinander umformen. Dies ist auch heute noch ein aktueller Forschungsschwerpunkt der statistischen Physik, bei der die sogenannten Phasenübergänge von Atomen und Molekülen untersucht werden. Die Modelle der statistischen Physik sind durch die Anzahl der Freiheitsgrade s bestimmt, was im Allgemeinen bei der numerischen Berechnung Probleme bereiten kann. Durch die Einführung von Pfadintegralen lässt sich dieses Problem lösen. Dies wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit deutlich.

2 Begriffe aus der statistischen Physik

2.1 Statistisches Ensemble

Zur Beschreibung eines isolierten Systems mit s Freiheitsgraden werden zum einen generalisierte Koordinate

$$\vec{q} = (q_1, q_2, \dots, q_s) \quad (2.1)$$

und die zugehörigen generalisierten Impulse:

$$\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_s). \quad (2.2)$$

Zusammen spannen sie den sogenannten Phasenraum auf. Jeder Mikrozustand des Systems entspricht dann einem bestimmten Phasenpunkt $\vec{\pi} = (\vec{q}, \vec{p})$ des Phasenraums. Die

Menge aller Punkte, die das Systems im Laufe der Zeit passiert, wird Phasentrajektorie genannt. Für ein konservatives System, das nicht explizit Zeitabhängig ist, ist die Phasentrajektorie eine geschlossene Kurve, da die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, die dieses System beschreiben Differentialgleichungen 1. Ordnung und somit eindeutig lösbar sind. In einem solchen Fall entspricht die Hamiltonfunktion der Energie des Systems. Damit ist die Fläche, die von der Trajektorie umschlossen wird eine $(2s-1)$ -dimensionale Energiehyperfläche. Wird diese Fläche in Volumenelemente unterteilt, lässt sich mithilfe der Dichteverteilungsfunktion $\rho(\vec{q}, \vec{p}, t)$ die Häufigkeit angeben, wie oft das System ein bestimmtes Volumenelement passiert. Werden diese Volumenelemente verkontinuierlicht und wird die Verteilungsfunktion durch die gesamte Anzahl von Zuständen dividiert, lässt sich die Wahrscheinlichkeit angeben, mit der ein bestimmtes Volumenelement passiert wird:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \rho(\vec{q}, \vec{p}, t). \quad (2.3)$$

Dabei definiert $Z = \int \dots \int d^s q d^s p \rho(\vec{q}, \vec{p}, t)$ die Zustandssumme. Von einer kanonischen Zustandssumme spricht man, wenn das isolierte System zusätzlich an ein Wärmebad angeschlossen wird.

In der Quantenstatistik wird der statistische Operator $\bar{\rho}$ eingeführt. Er ist gegeben durch:

$$\bar{\rho} = \frac{e^{-\beta \bar{H}}}{Z}. \quad (2.4)$$

Die Zustandssumme Z berechnet sich aus $Sp(e^{-\beta \bar{H}})$

2.2 Phasenübergänge

Der Begriff Phase beschreibt in der Thermodynamik einen möglichen makroskopischen Zustand eines Materials bzw. eines Systems im thermischen Gleichgewicht. Der Zustand selbst hängt von den äußeren Bedingungen ab. Diese Unterschiede spiegeln sich beispielsweise in den Aggregatzuständen oder die in dieser Arbeit behandelte Magnetisierung (Paramagnet, Ferromagnet, Antiferromagnet). Die äußeren Parameter, wie die Temperatur T , der Druck p oder das Magnetfeld \vec{B} bewirken in den sogenannten kritischen Bereichen einen Phasenübergang.

Experimente zeigen, dass es verschiedene Typen von Phasenübergängen gibt. Der Physiker Ehrenfest beschloss im Jahr 1933 den Phasenübergängen eine Ordnung zuzuschreiben. Dabei besagt ein Phasenübergang n -ter Ordnung nur, dass die $n-1$ -te Ableitung eines thermodynamischen Potentials nach ihren natürlichen Variablen verschwindet.

Ein wichtiger Begriff, der im Zusammenhang der Phasenübergänge erwähnt werden muss ist eine Ordnungsparameter. Dieser gibt Aussagen über die Ordnungen im System. Am Beispiel der freien Energie $F = U - TS$ lässt sich das leicht veranschaulichen. Dabei ist U die innere Energie und S die Entropie des Systems. Im Gleichgewicht muss die freie Energie ein Minimum annehmen. Günstig wäre also eine kleine innere Energie, was mit einer hohen Ordnung der Teilchen im System korreliert (z.B. die Ausrichtung der Spins parallel zu einem äußeren Magnetfeld). Andererseits wäre auch eine möglichst hohe Entropie

günstig, was mit einer hohen Unordnung einhergeht. Dies erfordert einen Kompromiss, der von der Temperatur abhängt. Hohe Temperaturen bewirken eine hohe Unordnung und niedrige Temperaturen bewirken eine hohe Ordnung. Dadurch wird die Phase mit niedrigerer Temperatur durch einen höheren Ordnungszustand ausgezeichnet.

2.3 Kritische Exponenten

Das Verhalten von Phasenübergängen 2. Ordnung lässt sich durch eine ganz bestimmte Zahl charakterisieren. Diese Zahl nennt man kritischen Exponenten. Größen wie die Wärmekapazität oder die magnetische Suszeptibilität lassen sich dadurch sehr leicht ausdrücken. Wir führen dazu die dimensionslose Größe ϵ ein:

$$\epsilon = \frac{T - T_C}{T_C}. \quad (2.5)$$

T_C entspricht der kritischen Temperatur. Die Wärmekapazität ist damit durch:

$$C_V \sim (-\epsilon)^{-\alpha'} \quad T < T_C \quad (2.6)$$

und

$$C_V \sim (\epsilon)^{-\alpha} \quad T > T_C \quad (2.7)$$

gegeben. Die Magnetische Suszeptibilität ergibt sich dann aus:

$$\chi \sim (-\epsilon)^{-\gamma'} \quad T < T_C \quad (2.8)$$

und

$$\chi \sim (\epsilon)^{-\gamma} \quad T > T_C. \quad (2.9)$$

2.4 Ising-Modell

Ising-Modell beschreibt die Wechselwirkung der Spins in einem Gitter mit einem äußeren Magnetfeld und mit den benachbarten Spins S_i . An jedem der N Gitterpunkte liegt also ein permanentes magnetisches Moment $\mu_i = \mu S_i$. Der Hamiltonoperator des Ising-Modells lautet dann:

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \mu B_0 \sum_i S_i \quad (2.10)$$

mit der Kopplungskonstante J_{ij} der benachbarten Spins. Dieser Operator wird im weiteren Verlauf bei der Berechnung der Zustandsumme wichtig sein.

3 Pfadintegrale

Pfadintegrale beschreiben eine alternative Formulierung der Quantenmechanik, bei der beim Übergang von einem Ort x' zu einem anderen x über alle möglichen Wege integriert wird. Abbildung 1 zeigt das Prinzip graphisch.

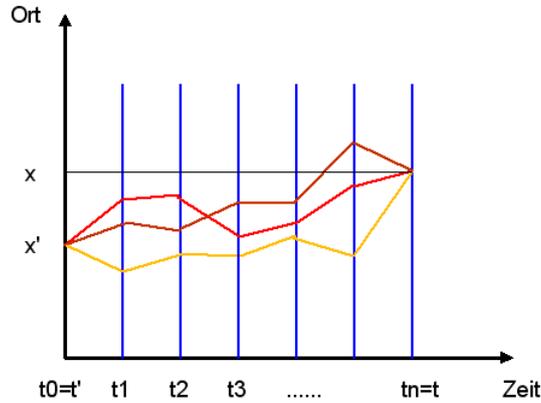


Abbildung 1: Graphische Darstellung von Pfadintegralen

Das Pfadintegral berechnet sich aus der der Integration der Wirkung S :

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\phi)\right) \quad (3.1)$$

Z wird auch als das erzeugende Funktional bezeichnet. $S(\phi)$ ist die Wirkung des Feldes ϕ . Man kann sie durch Integration der Lagrangedichte berechnen.

$$S(\phi) = \int dx^3 \mathcal{L}(x, t). \quad (3.2)$$

Die Ableitungen der Funktionale nach einem externen Feld werden als Green'sche Funktion $G^{(n)}$ bezeichnet. n definiert die Ordnung des Phasenübergangs.

Mithilfe der Wickrotation, bei der man zu komplexen Zeiten übergeht ($t \rightarrow i\tau$) lässt sich die Lagrangefunktion durch die Hamiltonfunktion ersetzen. Damit steht diese im Exponenten des Funktionals ähnlich wie bei der Zustandsumme Z der kanonischen Gesamtheit. Es besteht also ein Zusammenhang zwischen Pfadintegralen und der statistischen Physik. Es muss lediglich eine Substitution von $i\tau \rightarrow i\beta$ stattfinden. Diese sind durch das Plancksche Wirkungsquantum verbunden. Der Einfachheit halber wird diese zu 1 gesetzt.

4 Ising-Modell und Pfadintegrale

Die kanonische Zustandssumme ist gegeben durch:

$$Z[H] = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H(\{s_i\})} = \sum_{\{s_i\}} e^{\sum_{i,j} K_{ij} s_i s_j + \sum_i H_i s_i} \quad (4.1)$$

es wird die Annahme gemacht, dass an allen Gitterpunkten das selbe Magnetfeld $H_i = H$. Die Magnetisierung des i -ten Gitterpunktes ergibt sich aus dem erzeugenden Funktional:

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z[0]} \left. \frac{\delta Z[H]}{\delta H_i} \right|_{H=0} \quad (4.2)$$

Die Nettomagnetisierung M des gesamten Gitters ist definiert als:

$$M = \frac{1}{N} \langle s_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i G_i^{(1)}(r_i). \quad (4.3)$$

Die Suszeptibilität berechnet sich aus:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \left[\left. \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta^2 Z[H]}{\delta H_i \delta H_j} \right|_{H=0} - \left(\left. \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta Z[H]}{\delta H_i} \right|_{H=0} \right)^2 \right] = \frac{1}{N} \sum_{ij} G_{ij}^{(2)}(r_i - r_j) \quad (4.4)$$

4.1 Berechnung der Zustandssumme

Zur Berechnung der Zustandssumme wird folgendes Integral benötigt:

$$\int \exp \left[-\frac{1}{4a^2} x^2 + sx \right] = K \exp [a^2 s^2]. \quad (4.5)$$

Sei V_{ij} eine positiv definite Matrix. Dann ist:

$$\int \prod_{i=1}^N \exp \left[-\frac{1}{4} x_i V_{ij}^{-1} x_j + s_i x_i \right] = K \exp [s_i V_{ij} s_j]. \quad (4.6)$$

Damit haben wir die gekoppelten Spins auf der rechten Seite entkoppelt und stattdessen mit der Integrationsvariablen x_i verbunden.

Mithilfe der Hamiltonfunktion des Ising-Modells, der Abkürzung $K_{ij} = \beta J_{ij}$ und Gleichung 4.6 berechnet sich die Zustandssumme zu

$$\mathbb{Z}[H] = \int \prod dx_i \exp \left[-1/4 x_i K_{ij}^{-1} x_j \right] \sum_{\{s_i\}} \exp [(x_i + H) s_i] \quad (4.7)$$

Der rechte Teil des zweiten Summanden:

$$\sum_{\{s_i\}} \exp(H s_i) = N \quad (4.8)$$

liefert nur eine Konstante und wird im weiteren Verlauf ignoriert. Der andere linke teil liefert:

$$\sum_{\{s_i\}} \exp(x_i s_i) = \exp \left[\sum_i \ln(\cosh x_i) \right]. \quad (4.9)$$

Um eine Analogie zur freien Feldtheorie herstellen zu können, wird die Koordinatentransformation $x \rightarrow x - H$ durchgeführt. Das Funktion ergibt sich dann aus:

$$Z[H] = \exp \left[-H_i K_{ij}^{-1} H_j \right]. \quad (4.10)$$

$$\cdot \int \mathcal{D}x \exp \left[- \sum_i \psi_i K_{ij} \psi_j + \ln \cosh 2K_{ij} \psi_j + H \psi_i \right]$$

Das Feld wird definiert zu $\psi_i = \frac{1}{2} K_{ij} x_j$. Dies beschreibt einen Übergang von diskreten Gitterpunkten zu kontinuierlichen.

5 Freie Theorie

Um einen Bezug zur freien Theorie herstellen zu können, muss folgende Funktion in einer Taylorreihe entwickelt werden:

$$\ln \cosh x = \frac{1}{2} x^2 - \frac{1}{12} x^4 + \dots \quad (5.1)$$

Damit schreibt sich das Funktional als:

$$Z[H] = \int \mathcal{D}x \exp \left[\sum_i \left(\psi_i K_{ij} \psi_j + \frac{1}{2} (2K_{ij} \psi_j)^2 - \frac{1}{12} (2K_{ij} \psi_j)^4 + H_i \psi_i \right) \right] \quad (5.2)$$

Für ein freies skalares Feld gilt für die Lagrangedichte unter Einfluss eines externen Feldes h:

$$\mathcal{L} = A_0 (\nabla \phi_i)^2 + A_1 \phi_i^2 + A_2 \phi_2 + h \phi_i. \quad (5.3)$$

Bis auf die Vorfaktoren entspricht das genau dem Funktional $Z[H]$. Das Ziel ist es \mathcal{L} durch kontinuierliche Felder ϕ zu beschreiben.

$$Z[H] \sim \int \mathcal{D}\phi \exp \left[- \int \mathcal{L}[\phi, H] \right]. \quad (5.4)$$

Die Lagrangedichte ohne Wechselwirkungsfelder ist gegeben durch:

$$\int \mathcal{L}_0 = \sum_i \psi_i K_{ij} \psi_j - 2(K_{ij})^2. \quad (5.5)$$

Als nützliche Rechentechnik erweist hierbei der Wechsel in den Fourierraum.

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(ikr) \psi(k) \quad (5.6)$$

$$K_{ij} = K(r_i - r_j) = \frac{1}{N} \sum_k \exp[-ik(r_i - r_j)] K(k). \quad (5.7)$$

Die k 's entsprechen den reziproken Gittervektoren innerhalb der ersten Brilluinzone. Damit ergibt sich für die Lagrangedichte:

$$\int \mathcal{L}_0 = \sum_k [K(k) - 2|K(k)|^2] \psi(k) \psi(-k). \quad (5.8)$$

Nun werden die $K(k)$ Terme bis zur zweiten Ordnung entwickelt. Dies ist zulässig, da die anderen Terme sowieso später wegfallen. Damit folgt:

$$K(k) = K_0(1 - \rho^2 k^2). \quad (5.9)$$

Die Lagrangedichte lässt sich nun umschreiben zu:

$$\mathcal{L}_0 = \sum_k K_0 [(1 - 2K_0) + (4(K_0 - 1)\rho^2 k^2)] \psi(k) \psi(-k). \quad (5.10)$$

Für die Rücktransformation in den Ortsraum wird die Exponentialfunktion der Fourierreihe entwickelt:

$$K(k) = \sum_R K(R) \exp[ikR] = \sum_R K(R) [1 + \frac{1}{2}(ikR)^2 + \dots]. \quad (5.11)$$

Damit ergibt sich für den Gittervektor zweiter Ordnung

$$K_0(1 - \rho^2 k^2) \approx \sum_R K(R) \left[1 - \frac{1}{2}(kR)^2 \right]. \quad (5.12)$$

Da die Wechselwirkung bislang nicht weiter spezifiziert wurde, beschränken wir uns nur auf die der nächsten Nachbarn. Der Spin habe γ Nachbarn im Abstand a . Damit ergibt sich der feste Abstand $R = a$. K_{ij} ist definiert als βJ_{ij} . Durch Koeffizientenvergleich folgt:

$$K_0 = \sum_R K(R) = \gamma \beta J_0 \quad (5.13)$$

und

$$K_0 \rho^2 k^2 = \frac{1}{2} K(R) (kR)^2 \approx K_0 a^2 k^2 \quad (5.14)$$

6 Berechnung von χ

Damit ist $\rho = a$. Für ein bestimmtes K_0 verschwindet die Dichte bei $k = 0$:

$$K_0 = \gamma\beta J_0 = \gamma J_0 \frac{1}{k_B T_0} \quad (5.15)$$

$$\Rightarrow T_0 = 2\gamma J_0 \frac{1}{k_B}. \quad (5.16)$$

Dies ist der Punkt an dem die freie Theorie instabil wird. T_0 ist aber genau die Temperatur, bei der der Phasenübergang stattfindet. Hier entwickelt man die einzelnen Terme um T_0 herum:

$$1 - 2K_0 = \epsilon + \dots \quad (5.17)$$

$$4K_0 - 1 = 1 + \dots \quad (5.18)$$

und

$$K_0 = \frac{1}{2} + \dots \quad (5.19)$$

Mit den Definitionen $\phi = \rho\psi$ und $\mu^2 = \frac{1}{\rho^2}\epsilon$ ergibt sich:

$$\int \mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \sum_k (k^2 + \mu^2) \phi(k) \phi(-k). \quad (5.20)$$

Zurück in den Ortsraum ergibt die Klein-Gordon Gleichung der freien Feldtheorie:

$$\int \mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \int dx [(\nabla\phi)^2 + \mu^2\phi^2]. \quad (5.21)$$

Damit lässt sich ein s -dimensionales statistisches System auf ein d -dimensionales Problem reduzieren.

6 Berechnung von χ

Als Beispiel wird zuletzt noch die Magnetische susceptibilität χ berechnet. Nach Gleichung 4.4 benötigt man dazu die erste und zweite Ableitung des erzeugenden Funktionals. Zuerst berechnen wir aber die Magnetisierung M , da sich diese aus der ersten Ableitung nach H bei $H=0$ ergibt. Da die Ableitung proportional zu H ist verschwindet dies also an dieser Stelle. Durch einfaches Ableiten kann dies überprüft werden. Die zweite Ableitung entspricht aber gerade dem der zwei-Punkt Green'schen Funktion, die gegeben ist durch:

$$G_0^{(2)} = \frac{1}{k^2 + \mu^2} \sim \epsilon^{-1} \quad (6.1)$$

Die Magnetisierung ist Null unerhalb der kritischen Temperatur, was jedoch nicht verwundert, da dies eine spontane Symmetriebrechung beschreiben würde. Die Selbstwechselwirkung kann allerdings erst bei einer ϕ^4 -Theorie beschrieben werden.

7 Literaturverzeichnis

- [1] W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 6: *Statistische Physik*, Springer Spektrum (2013)
- [2] J. Zinn. *Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford Science Publications (1977)
- [3] D.J. Amit, V. Mahin-Mayer: *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*, World Scientific (2005)