B

Potenzgesetze

Power Laws

4 Kritische Exponenten

Bereits um die Jahrhundertwende 1900 war bekannt, dass das Molekularfeld-Verhalten etwa der van der Waals-Gleichung das Verhalten in der Umgebung des kritischen Punktes nicht korrekt beschreibt. (Zur Geschichte der kritischen Phänomene siehe J.M.H. Levelt-Sengers, Physica 73 (1974) 73.)

Beispielsweise hatte man experimentell gefunden, dass die Dichte des Gases bzw. der Flüssigkeit nicht durch $\rho - \rho_c \propto (T - T_c)^\beta$ mit $\beta = 1/2$ beschrieben wird, sondern mit $\beta = 0.3434$ (Verschaffelt 1900). Auch die anderen Größen, wie Suszeptibilität, spezifische Wärme, Korrelationen zeigten Gesetze mit anderen Potenzen,

4 Critical exponents

Already at the turn of the century 1900 it was known, that the molecular field behaviour of the Van der Waals equation does not describe the behaviour in the vicinity of the critical point correctly. (For the history of critical phenomena see J.M.H. Levelt-Sengers, Physica 73 (1974) 73.)

Experimentally it was found e.g. that the density of a gas and a fluid, resp., is not described by $\rho - \rho_c \propto (T - T_c)^\beta$ with $\beta = 1/2$, but with $\beta = 0.3434$ (Verschaffelt 1900). Also other quantities like the susceptibility, specific heat, correlations showed laws with other powers,

$$\begin{array}{ll}
\text{spezifische Wärme / specific heat} & C \propto \tau^{-\alpha} \\
\text{Ordnungsparameter bei / order parameter at } h = 0 & m \propto \tau^{\beta} \\
\text{Suszeptibilität / susceptibility} & \chi \propto \tau^{-\gamma} \\
\text{Ordnungsparameter bei / order parameter at } T = T_c & m \propto h^{1/\delta} \\
\text{Korrelation bei / correlation at } T_c & g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{2-d-\eta} \\
\text{Korrelationslänge / correlation length} & \xi \propto \tau^{-\nu}.
\end{array} \tag{4.1}$$

Man bezeichnet die Größen α, β, γ, δ, η und ν als kritische Exponenten. In der folgenden Tabelle zeigen wir einige Werte von kritischen Exponenten

The quantities α, β, γ, δ, η and ν are called critical exponents. In the following table we show some values of critical exponents

Exponent exponent	Molekularfeld molecular field	Ising-M. Ising m. $d=2$	Ising-M. Ising m. $d=3$	Heisenberg-M. Heisenberg m. $d=3$	sphärisches M. spherical m. $d=3$
α	0(Sprung jump)	0(ln)	0.109	−0.116	−1
β	1/2	1/8	0.325	0.365	1/2
γ	1	7/4	1.241	1.387	2
δ	3	(15)	4.82	4.80	5
η	0	1/4	0.031	0.033	0
ν	1/2	1	0.630	0.705	1

(4.2)

Zunächst haben wir die Molekularfeld-Werte angegeben. Als nächstes die des zweidimensionalen Ising-Modells. Onsager gelang 1944 die Lösung dieses Modells. Er fand, dass die spezifische Wärme eine logarithmische Singularität hat. Weitere Rechnungen, vor allem von Yang (1952), brachten auch die spontane Magnetisierung und die Suszeptibilität. Allerdings kennt man die exakte Lösung dieses Modells nur für $h = 0$.

Man erkannte hieraus, wie auch aus Rechnungen für das sphärische Modell (Berlin und Kac 1952), dass die kritischen Exponenten sich durchaus von den Molekularfeld-Werten unterscheiden können. Auf die Werte des dreidimensionalen Ising- und Heisenberg-Modells werde ich später zurückkommen. Es sei aber bereits bemerkt, dass die Werte für das dreidimensionale Ising-Modell auch für Flüssigkeiten am kritischen Punkt zutreffen sollten. Man sieht, dass Verschaffelts Exponent $\beta = 0.3434$, der tatsächlich nicht so präzis gemessen wurde, gut mit dem $\beta = 0.325$ für das Ising-Modell übereinstimmt.

At first we have given the molecular field values. Next the exponents of the two-dimensional Ising model are listed. In 1944 Onsager succeeded in solving this model. He found that the specific heat has a logarithmic singularity. Further calculations in particular by Yang (1952) produced the magnetization and the susceptibility. However, the exact solution of this model is only known for $h = 0$.

From this solution as well as from the solution of the spherical model (Berlin and Kac 1952) one learned that the critical exponents may indeed be different from those of molecular field theory. Later we will come back to the exponents for the three-dimensional Ising and Heisenberg models. We note however, that the values for the three-dimensional Ising model should also apply for fluids at the critical point. One realizes, that Verschaffelt's exponent $\beta = 0.3434$, who actually did not measure that precisely, is in good agreement with $\beta = 0.325$ for the Ising model.

5 Sphärisches Modell

5 Spherical Model

Das von Berlin und Kac erfundene sphärische Modell (Phys. Rev. 86 (1952) 821) trägt viele typische Züge kritischer Phänomene. Viele unterscheiden sich von der Molekularfeld-Näherung. Darüber hinaus kann es recht elementar gelöst werden.

The spherical model invented by Berlin and Kac (Phys. Rev. 86 (1952) 821) has many typical features of critical phenomena. Many features deviate from that of the molecular-field theory. Moreover it can be solved by elementary calculations.

Das Modell besteht aus lokalen 'klassischen Spins' $S(\mathbf{r})$ an Gitterpunkten $\mathbf{r}$, die kontinuierliche Variable sind. Die Wechselwirkung ist gegeben durch

The model consists of local 'classical spins' $S(\mathbf{r})$ at lattice points $\mathbf{r}$, which are continuous variables. The interaction is given by

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{rr}'}(\mu - I(\mathbf{r}-\mathbf{r}'))S(\mathbf{r})S(\mathbf{r}') - h\sum_{\mathbf{r}} S(\mathbf{r}). \tag{5.1}$$

Im strengen Sinn ist die Wechselwirkung gegeben durch den Term mit der Kopplung I. h ist das magnetische Feld und μ wird als Lagrangeparameter eingeführt, um die 'Spins' endlich zu halten. Ursprünglich lautete die Bedingung $\sum_{\mathbf{r}} S^2(\mathbf{r}) = N$, wobei N die Anzahl der Gitterpunkte ist. Wir schwächen die Bedingung ab auf

The interaction in the strict sense is given by the term with the coupling I. h is the magnetic field and μ is introduced as a Lagrange parameter to keep the 'spins' finite. Originally the condition was $\sum_{\mathbf{r}} S^2(\mathbf{r}) = N$, where N is the number of lattice points. We relax the condition to

$$\sum_{\mathbf{r}}\langle S^2(\mathbf{r})\rangle = N \tag{5.2}$$

und passen den Lagrangeparameter μ so an, dass diese Bedingung erfüllt ist. Wir führen die Fourier-Transformierte

and adjust the Lagrange parameter μ, so that the condition is fulfilled. We introduce the Fourier transform

$$S(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{qr}} S_{\mathbf{q}} \tag{5.3}$$

ein und erhalten

and obtain

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}(\mu - I_{\mathbf{q}})S_{\mathbf{q}}S_{-\mathbf{q}} - h\sqrt{N}S_0, \quad I_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{a}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{qa}} I(\mathbf{a}). \tag{5.4}$$

Dann erhalten wir

Then we obtain

$$\langle S_{\mathbf{q}}S_{-\mathbf{q}}\rangle = \frac{1}{\beta(\mu - I_{\mathbf{q}})} + \delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}} N m^2 \tag{5.5}$$

mit dem Ordnungsparameter

with the order parameter

$$m = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{r}}\langle S(\mathbf{r})\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\langle S_{\mathbf{0}}\rangle = \frac{h}{\beta(\mu - I_0)}. \tag{5.6}$$

Die Bedingung (5.2) lautet dann

Then the condition (5.2) reads

$$m^2 + \frac{k_{\mathrm{B}}T}{N}\sum_{\mathbf{q}}\frac{1}{\mu - I_{\mathbf{q}}} = m^2 + \frac{k_{\mathrm{B}}TV}{(2\pi)^d N}\int \mathrm{d}^d q \frac{1}{\mu - I_{\mathbf{q}}} = 1. \tag{5.7}$$

Wir gehen nun von einer kurzreichweitigen Wechselwirkung aus. Dann ist I_0 positiv und für kleines $\mathbf{q}$ können wir entwickeln

We assume now a short-range attractive interaction. Then I_0 is positive and for small $\mathbf{q}$ we have the expansion

$$I_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{r}}(1 + \mathrm{i}\mathbf{qr} - \frac{(\mathbf{qr})^2}{2} + \ldots)I(\mathbf{r}) = I_{\mathbf{0}} - \frac{D}{2}q^2, \tag{5.8}$$

Der Term, der linear in $\mathbf{q}$ ist, verschwindet, da $I(-\mathbf{a}) = I(\mathbf{a})$. Bei sehr hohen Temperaturen ist I vernachlässigbar und $\mu \approx k_\mathrm{B}T$. Beim Absenken der Temperatur nähert sich μ an $I_\mathbf{0}$. Die kritsche Temperatur, bei der das geschieht, ist gegeben durch

The term linear in $\mathbf{q}$ vanishes since $I(-\mathbf{a}) = I(\mathbf{a})$. At very high temperatures I is negligible and $\mu \approx k_\mathrm{B}T$. In lowering the temperature μ approaches $I_\mathbf{0}$. The critical temperature where this happens is given by

$$\frac{1}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}} = \frac{V}{(2\pi)^d N}\int \mathrm{d}^d q \frac{1}{I_0 - I_q} \approx \frac{2V}{(2\pi)^d D N}\int \mathrm{d}^d q \frac{1}{q^2}. \tag{5.9}$$

Wir bemerken, dass es in $d \leq 2$ keinen Phasenübergang gibt. Die Dimension $d = 2$ wird als untere kritische Dimension bezeichnet.

We note that there is no phase transition in $d \leq 2$ dimensions. The dimension $d = 2$ is called the lower critical dimension of this system.

5.a $\mathbf{2 < d < 4}$

5.a $\mathbf{2 < d < 4}$

In $d > 2$ Dimensionen gibt es einen Phasenübergang. Betrachten wir d als kontinuierliche Variable, dann kann das Integral auf der rechten Seite geschrieben werden als

In $d > 2$ there is a phase transition. If we consider d a continuous variable, then the integral on the right-hand side can be written

$$\int \mathrm{d}^d q \frac{1}{q^2} = \Omega_d \int \mathrm{d}q\, q^{d-3} = \Omega_d \frac{\Lambda^{d-2}}{d-2}. \tag{5.10}$$

Ω_d ist die Hyperfläche einer d-dimensionalen Hyperkugel und Λ die typische Ausdehnung der Brillouin zone. Da weder Ω_d noch Λ wesentlich von d abhängen, finden wir, dass $T_\mathrm{c} \propto d-2$, ein Ergebnis, dass man aus Entwicklungen in der Dimension $d = 2+\epsilon$ kennt.

Ω_d is the hypersurface of the d-dimensional hypersphere and Λ is the typical extension of the Brillouin zone. Since both Ω_d and Λ do not depend crucially on d, we find, that $T_\mathrm{c} \propto d-2$, a result known from expansions in dimensions $d = 2+\epsilon$.

Wir betrachten das Verhalten des Integrals (5.7) nahe des Übergangs und zerlegen

We consider the behaviour of the integral (5.7) close to the transition and separate

$$\begin{aligned}
&\frac{V}{(2\pi)^d N}\int \mathrm{d}^d q \frac{1}{\mu - I_q} \\
= \;& \frac{V}{(2\pi)^d N}\int \mathrm{d}^d q \frac{1}{I_0 - I_q} + \frac{V}{(2\pi)^d N}\int \mathrm{d}^d q \frac{I_0 - \mu}{(\mu - I_q)(I_0 - I_q)} \\
\approx \;& \frac{1}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}} + (I_0 - \mu)\frac{2V}{(2\pi)^d D N}\int \mathrm{d}^d q \frac{1}{(\mu - I_0 + \frac{D}{2}q^2)q^2}.
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Für $d < 4$ divergiert das letzte Integral wie $(\mu - I_0)^{(d-4)/2}$. Daher reduziert sich Gleichung (5.7) auf

For $d < 4$ the last integral diverges like $(\mu - I_0)^{(d-4)/2}$. Thus eq. (5.7) reduces to

$$m^2 + \frac{T}{T_\mathrm{c}} - c(\mu - I_0)^{(d-2)/2} = 1. \tag{5.12}$$

Wenn wir $\mu - I_0$ mittels (5.6) ausdrücken, dann erhalten wir die Zustandsgleichung

If we express $\mu - I_0$ by means of (5.6) then we obtain the equation of state

$$m^2 = 1 - \frac{T}{T_\mathrm{c}} + c\left(\frac{h k_\mathrm{B} T}{m}\right)^{(d-2)/2}. \tag{5.13}$$

Wir diskutieren einige Eigenschaften dieser Zustandsgleichung. Nähere sich h an 0 für $T > T_\mathrm{c}$. Dann ist m/h die Suszeptibilität χ and m geht gegen 0,

We discuss some properties of this equation of state. Let h approach 0 for $T > T_\mathrm{c}$. Then m/h is the susceptiblity χ and m approaches 0,

$$1 - \frac{T}{T_\mathrm{c}} + c\left(\frac{k_\mathrm{B} T}{\chi}\right)^{(d-2)/2} = 0, \tag{5.14}$$

was das Verhalten der Suszeptibilität ergibt

which yields the behavior of the susceptibility

$$\chi = \frac{k_{\mathrm{B}} T c^{\gamma}}{(\frac{T}{T_{\mathrm{c}}} - 1)^{\gamma}}, \quad \gamma = \frac{2}{2-d}. \tag{5.15}$$

Bei $T = T_{\mathrm{c}}$ erhalten wir aus Gl. (5.13)

At $T = T_{\mathrm{c}}$ we obtain from eq. (5.13)

$$m^2 = c \left(\frac{h k_{\mathrm{B}} T}{m} \right)^{(d-2)/2} \tag{5.16}$$

woraus

which yields

$$m = c^{2/(d+2)} (h k_{\mathrm{B}} T_{\mathrm{c}})^{1/\delta}, \quad \delta = \frac{d+2}{d-2} \tag{5.17}$$

folgt. Unterhalb T_{c} erhalten wir für $h = 0$ die spontane Magnetisierung

. Below T_{c} we obtain for $h = 0$ the spontaneous magnetization

$$m_0 = \left(1 - \frac{T}{T_{\mathrm{c}}} \right)^{\beta}, \quad \beta = \frac{1}{2}. \tag{5.18}$$

Unterhalb T_{c} ändert ein schwaches magnetisches Feld h die Magnetisierung zu

Below T_{c} a weak magnetic field h changes the magnetization

$$m^2 = m_0^2 + c \left(\frac{h k_{\mathrm{B}} T_c}{m_0} \right)^{(d-2)/2}, \tag{5.19}$$

wobei wir $T \approx T_{\mathrm{c}}$ und $m \approx m_0$ im letzten Term approximiert haben. Daher ist die Suszeptibilität bei $h = 0$ nicht endlich, sondern m wächst an um

where we have approximated $T \approx T_{\mathrm{c}}$ and $m \approx m_0$ in the last term. Thus the susceptibility is not finite at $h = 0$, but m increases by

$$\delta m = \frac{c}{2 m_0} \left(\frac{h k_{\mathrm{B}} T_c}{m_0} \right)^{(d-2)/2}. \tag{5.20}$$

Dieses Verhalten ist typisch für Systeme mit einer kontinuierlich gebrochenen Symmetrie, das heißt für Systeme, in denen S ein Vektor ist und die Wechselwirkung (ohne den hS-Term) unter globalen Rotationen dieses Vektors invariant ist.

This behaviour is typical for systems with a continuous broken symmetry, that is for a system, where S is a vector and the interaction (without the hS term) is invariant under global rotation of this vector.

Die Korrelationslänge ξ erhält man aus (5.5)

The correlation length ξ is obtained from (5.5)

$$\langle S_{\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q}} \rangle = \frac{2 k_{\mathrm{B}} T}{D(\xi^{-2} + q^2)}, \quad \xi^{-2} = \frac{2}{D} (\mu - I_0). \tag{5.21}$$

Daher divergiert sie oberhalb T_{c} wie

Thus above T_{c} it diverges like

$$\xi \propto (T - T_{\mathrm{c}})^{-\nu}, \quad \nu = \frac{1}{d-2}. \tag{5.22}$$

Unterhalb T_{c} ist sie bei $h = 0$ unendlich. Auch dies ist typisch für eine gebrochene kontinuierliche Symmetrie.

Below T_{c} it is infinite at $h = 0$. Again this is typically for systems with broken continuous symmetry.

In einem verschwindenden Magnetfeld $h = 0$ ist die Energie des Systems gegeben durch

At vanishing magnetic field, $h = 0$, the energy of the system is given by

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} I(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle S(\mathbf{r}) S(\mathbf{r}') \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} I_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q}} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} (\mu - I_{\mathbf{q}}) \langle S_{\mathbf{q}} S_{-\mathbf{q}} \rangle - \frac{\mu}{2} N = \frac{N}{2} (k_{\mathrm{B}} T - \mu), \end{aligned} \tag{5.23}$$

wobei wir in der letzten Zeile den Erwartungswert (5.5) verwendet haben, und dass m^2 oberhalb T_c und $\boldsymbol{I_0} - \mu$ unterhalb T_c verschwindet.

where in the last line we have used the expectation value (5.5) and that m^2 vanishes above T_c and $\boldsymbol{I_0} - \mu$ vanishes below T_c.

Unterhalb T_c ist $\mu = \boldsymbol{I_0}$ konstant. Daher ist die spezifische Wärme gegeben durch

Below T_c one has constant $\mu = \boldsymbol{I_0}$. Thus the specific heat is given by

$$c = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = \frac{Nk_\mathrm{B}}{2}. \tag{5.24}$$

Oberhalb T_c verwenden wir

Above T_c we use

$$\mu - \boldsymbol{I_0} = \left(\frac{1}{c}(\frac{T}{T_\mathrm{c}} - 1)\right)^{2/(d-2)} \tag{5.25}$$

aus Gleichung (5.13). Daher hat man zusätzlich zu dem konstanten Beitrag in (5.24) einen Beitrag

from equation (5.13). Thus in addition to the constant contribution in (5.24) we have a term

$$c_\mathrm{sing} \propto \left(\frac{T}{T_\mathrm{c}} - 1\right)^{-\alpha}, \quad \alpha = \frac{d-4}{d-2}. \tag{5.26}$$

In $d = 3$ Dimensionen gibt es einen Knick in der spezifischen Wärme bei T_c, das heißt man hat eine Diskontinuität in der Steigung der spezifischen Wärme.

In $d = 3$ dimensions there is a kink in the specific heat at T_c, that is there is a discontinuity in the slope of the specific heat.

5.b d > 4

5.b d > 4

Die Situation ist in $d > 4$ Dimensionen anders. Das letzte Integral in (5.11) konvergiert für $\mu = I_0$. Wenn wir diesen führenden Beitrag mitnehmen, erhalten wir

The situation is different in $d > 4$ dimensions. Then the last integral in (5.11) converges for $\mu = I_0$. Taking this leading contribution into account we obtain

$$m^2 + \frac{T}{T_\mathrm{c}} - c(\mu - I_0) = 1 \tag{5.27}$$

und unter Verwendung von (5.6)

and using eq. (5.6)

$$m^2 = 1 - \frac{T}{T_\mathrm{c}} + c\frac{hk_\mathrm{B}T}{m} \tag{5.28}$$

oder

or

$$m^3 = m\left(1 - \frac{T}{T_\mathrm{c}}\right) + chk_\mathrm{B}T, \tag{5.29}$$

was vom Typ des Molekularfeld-Verhaltens ist

which is of molecular field type.

Ähnlich erhält man oberhalb T_c bei $h = 0$

Similarly one obtains above T_c at $h = 0$

$$\mu = I_0 + \frac{1}{c}\left(1 - \frac{T}{T_\mathrm{c}}\right). \tag{5.30}$$

Daher erhalten wir

Thus we obtain

$$\frac{\mathrm{d}\mu}{\mathrm{d}T} = \frac{1}{cT_\mathrm{c}}, \tag{5.31}$$

was einen Sprung

which yields a jump

$$c(T_\mathrm{c} - 0) - c(T_\mathrm{c} + 0) = \frac{N}{2cT_\mathrm{c}} \tag{5.32}$$

in der spezifischen Wärme ergibt

in the specific heat.

5.c d = 4

In vier Dimensionen divergiert das letzte Integral in Gl. (5.11) logarithmisch, wenn μ sich $I_\mathbf{0}$ nähert

In four dimensions the last integral in eq.(5.11) diverges logarithmically as μ approches $I_\mathbf{0}$

$$\frac{V}{(2\pi)^d N}\int \mathrm{d}^d q \frac{1}{\mu - I_q} \approx \frac{1}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}} - (I_0 - \mu)\frac{2V}{(2\pi)^4 D^2 N}\Omega_4 \ln\left(\frac{2(\mu - I_0)}{D\Lambda^2}\right), \tag{5.33}$$

wobei das Integral bis zum Abschneide-Impuls Λ erstreckt wurde. Daher erhalten wir

where the integral is extended to the cut-off Λ. Thus we obtain

$$m^2 + c(\mu - I_0)\ln\left(\frac{\mu - I_0}{\mu - I_0 + \frac{D}{2}\Lambda^2}\right) = 1 - \frac{T}{T_\mathrm{c}}. \tag{5.34}$$

Daher finden wir, dass oberhalb T_c die Suszeptibilität dem Verhalten

As a consequence we find that above T_c the susceptibility obeys

$$\chi \ln \chi \propto \frac{1}{\frac{T}{T_\mathrm{c}} - 1} \tag{5.35}$$

genügt und dass der Beitrag $\mathrm{d}\mu/\mathrm{d}T$ zur spezifischen Wärme oberhalb T_c zu einem Verhalten

and that the contribution $\mathrm{d}\mu/\mathrm{d}T$ to the specific heat above T_c leads to a behaviour

$$\frac{\mathrm{d}\mu}{\mathrm{d}T} \propto \frac{-1}{\ln(\mu - I_0)} \tag{5.36}$$

führt. Man beachte, dass das Inverse des Logarithmus sich von der logarithmischen Divergenz der spezifischen Wärme des zweidimensionalen Ising-Modells unterscheidet.

. Note that this inverse of the logarithm is different from the logarithmic divergence of the specific heat in the two-dimensional Ising model.

Abschließend bemerken wir, dass man sehr ähnliche Ergebnisse für die Bose-Kondensierung des idealen Bose-Gases in d Dimensionen erhält. Dort ist allerdings das symmetriebrechende Feld experimentell nicht zugänglich. Theoretisch kann es als Linearkombination des Erzeugungs- und Vernichtungs-Operators von Teilchen mit Impuls null ausgedrückt werden.

Finally we remark, that one obtains very similar results for the Bose condensation of an ideal Bose gas in d dimensions. There however the symmetry breaking field is experimentally not available. Theoretically it can be expressed as linear combination of the creation and annihilation operators of particles with zero momentum.

6 Hoch-Temperatur Entwicklungen

6.a Reihenanalyse

Lange Zeit bestand ein gutes Verfahren zur theoretischen Abschätzung kritischer Exponenten in der Berechnung und Auswertung von Hochtemperatur-Entwicklungen (und auch einiger Tief-Temperatur und Hochfeld-Entwicklungen). Die grundsätzliche Idee ist die folgende: Betrachte zum Beispiel die Entwicklung der Suszeptibilität nach Potenzen von $1/T$,

$$\chi = \sum_n \frac{c_n}{T^n}. \tag{6.1}$$

Falls diese Entwicklung ein Potenzgesetz beschreibt,

$$\chi = A(1 - \frac{T_c}{T})^{-\gamma} \tag{6.2}$$

dann erhält man

$$c_n = \frac{A(-\gamma)!(-T_c)^n}{n!(-\gamma-n)!}, \quad a! = \Gamma(a+1), \tag{6.3}$$

so dass der Quotient zweier aufeinander folgender Koeffizienten gegeben ist durch

$$\frac{c_n}{c_{n-1}} = \frac{T_c(\gamma+n-1)}{n} = T_c + \frac{T_c(\gamma-1)}{n}. \tag{6.4}$$

Daher trägt man diese Quotienten gegen $1/n$ auf. Die lineare Extrapolation auf $1/n = 0$ ergibt die kritische Temperatur and die Steigung erlaubt die Bestimmung von $\gamma-1$. Mit dieser Methode erhält man sehr gute Abschätzungen für die kritischen Exponenten.

6 High-temperature Expansions

6.a Analysis of Series

For a long time a very good technique to estimate critical exponents theoretically were high-temperature expansions (and also some low-temperature or high-filed expansions). The basic idea is the following: Consider an expansion for the susceptibility in powers of $1/T$,

If this expansion describes a power law,

then one finds

so that the ratio of two successive coefficients is given by

Thus one plots these ratios versus $1/n$. Linearly extrapolating to $1/n = 0$ yields the critical temperatur and the slope allows the determination of $\gamma - 1$. Using this method one obtained very good estimates for critical exponents.

6.b Berechnung von Reihen

Wir betrachten kurz, wie man solche Entwicklungen erhält. Betrachten wir das Ising-Modell. Die Wechselwirkung lautet

$$H = I \sum_{\mathrm{nn}} S(\mathbf{r})S(\mathbf{r}'), \tag{6.5}$$

wobei nn anzeigt, dass die Summe über Paare **n**ächster **N**achbarn läuft. Dann erhalten wir

$$\mathrm{e}^{-\beta H} = \prod_{nn} \mathrm{e}^{-KS(\mathbf{r})S(\mathbf{r}')} = \prod_{nn}(\cosh K + \sinh K S(\mathbf{r})S(\mathbf{r}')) = \mathrm{const} \prod_{nn}(1 + tS(\mathbf{r})S(\mathbf{r}')), \tag{6.6}$$

$$K = \beta I, \quad t = \tanh(\beta I) = \tanh\left(\frac{I}{k_B T}\right). \tag{6.7}$$

6.b Calculation of series

Let us shortly consider, how such expansions are obtained. Let us consider the Ising model. The interaction reads

where nn indicates that the sum runs over pairs of **n**earest **n**eighbours. Then we have

Wir haben dabei verwendet, dass $S(\mathbf{r})S(\mathbf{r}')$ nur die Werte ± 1 annehmen kann. Wir können t an Stelle von $1/T$ als Entwicklungs-Variable verwenden oder wir entwickeln t nach Potenzen von $1/T$.

We have used, that $S(\mathbf{r})S(\mathbf{r}')$ can only assume the two values ± 1. We may use t instead of $1/T$ as expansion variable or we may expand t in powers of $1/T$.

Die Suszeptibilität ist proportional zu $\sum_{\mathbf{R}} \langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{R})\rangle$. Wir müssen daher

The susceptibility is proportional to $\sum_{\mathbf{R}} \langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{R})\rangle$. Thus one has to expand

$$\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{R})\rangle = \frac{\sum_{\{S\}} S(\mathbf{0})S(\mathbf{R}) \prod_{\rm nn}(1 + tS(\mathbf{r})S(\mathbf{r}'))}{\sum_{\{S\}} \prod_{\rm nn}(1 + tS(\mathbf{r})S(\mathbf{r}'))} \tag{6.8}$$

entwickeln. Man muss nun alle Beiträge in Zähler und Nenner bis zu einer bestimmten Potenz in t bestimmen. Offensichtlich ergibt die Summe über alle Konfigurationen $\{S\}$ null, falls ein Produkt einen Faktor $S(\mathbf{r})$ in ungerader Anzahl enthält. Nur wenn alle Faktoren in gerader Anzahl auftreten (natürlich ist auch null gerade), dann ergibt die $\{S\}$-Summation 2^N. Wir führen nun Diagramme für die Produkte ein, indem wir die Faktoren $tS(\mathbf{r})S(\mathbf{r}'))$ durch eine Linie zwischen $\mathbf{r}$ und $\mathbf{r}'$ kennzeichnen. Daher gibt es zwischen nächsten Nachbarn entweder keine Linie (Faktor 1) oder eine Linie (Faktor t). Es tragen dann die Diagramme bei, in denen an jedem Gitterpunkt eine gerade Anzahl von Linien zusammentrifft. Wo wir von der Korrelation einen Faktor $S(\mathbf{r})$ haben, muss diese Anzahl ungerade sein. (Bei zwei Faktoren $S(\mathbf{r})$ am gleichen Ort wieder gerade, etc.)

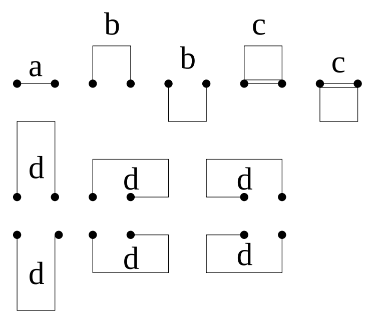
. One has now to determine all contributions in the nominator and denominator up to certain powers of t. Apparently the sums over all configurations $\{S\}$ yields zero if a product contains one of the factors $S(\mathbf{r})$ an odd number of times. Only if all factors appear for an even number of times (of course zero is also even), then the $\{S\}$-summation yields 2^N. We introduce diagrams for products by drawing bonds between $\mathbf{r}$ and $\mathbf{r}'$ for the factors $tS(\mathbf{r})S(\mathbf{r}'))$. Thus between nearest neighbors there is either no bond (factor 1) or one bond (factor t). Then those diagrams contribute, in which at each lattice point an even number of bonds meet. At points, where there is a factor $S(\mathbf{r})$ of the correlations, the number of entering lines has to be odd. (If there are two factors $S(\mathbf{r})$ at the same point then even, and so on.)

Als Beispiel betrachten wir das Ising-Modell auf einem quadratischen Gitter. Wir beginnen mit dem Nenner, der die Zustandssumme Z ist. Der Term nullter Ordnung ergibt 2^n und auch die Konstante in Gl. (6.7), welche eine Potenz von $\cosh K$ ist. Es gibt keine Beiträge in erster, zweiter und dritter Ordnung in t, aber in vierter Ordnung erhalten wir einen Beitrag von jeder der N Plaquetten (N ist die Anzahl der Gitterpunkte) bestehend aus den vier Linien um ein elementares Quadrat. Daher erhalten wir

As an example we consider the Ising model on a square lattice. Let us begin with the denominator which is the partition sum Z. The zeroth order term yields the factor 2^n and also the const. in eq. (6.7) which is a power of $\cosh K$. There are no contributions in first, second and third order in t, but in fourth order we obtain a contribution for each of the N plaquettes (N is the number of lattice sites) consisting of the four bonds around an elementary square. Thus we obtain

$$\text{denominator}/2^N = 1 + Nt^4 + O(t^6). \tag{6.9}$$

Wir betrachten jetzt den Zähler. Für $\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{0})\rangle$ ist das Ergebnis trivial. Im Vergleich zum Nenner haben wir zwei zusätzliche Faktoren $S(\mathbf{0})$, was bedeutet, dass wir exakt die gleiche Summe erhalten. Der Quotient ist eins, was erwartet wurde, da $S(\mathbf{0})S(\mathbf{0}) = 1$. Wir betrachten daher $\langle S(0,0)S(1,0)\rangle$.



Now we consider the numerator. For $\langle S(\mathbf{0})S(\mathbf{0})\rangle$ the result is trivial. In comparison to the denominator we have two extra factors $S(\mathbf{0})$, which means that we have exactly the same sum. The ratio is one, which was expected, since $S(\mathbf{0})S(\mathbf{0}) = 1$. Therefore let us consider $\langle S(0,0)S(1,0)\rangle$.

Hier erhalten wir keinen Beitrag in nullter Ordnung, aber einen in erster Ordnung von dem Faktor $tS(0,0)S(1,0)$ (in der Figur mit a bezeichnet).

In zweiter Ordnung wie auch in allen geraden Ordnungen erzhalten wir keine Beiträge. Es gibt jedoch zwei Beiträge in Ordnung t^3 (mit b bezeichnet). In fünfter ordnung ist die Situation komplizierter. Man kann einen Faktor $tS(0,0)S(1,0)$ und ein Produkt aus vier Faktoren, die eine Plaquette erzeugt, fast überall erzeugen. In zwei Fällen ist dies nicht möglich. Dies sind die Fälle, in denen eine Linie mit der Linie von (00) nach (10) identisch ist (Kennzeichnung c). Andererseits haben wir sechs neue Möglichkeiten wie in der Figur gezeigt, (Kennzeichnung d), so dass der Zähler

There we obtain no contribution in zeroth order, but one in first order from the factor $tS(0,0)S(1,0)$ (marked a in the figure).

In second order as well as in all even orders we do not obtain any contributions, but there are two contributions of order t^3 (marked b). In fifth order the situation is more complicated. One can place one factor $tS(0,0)S(1,0)$ and a product of four factors which generate a plaquette nearly everywhere. There are two exceptions where this is not possible. These are the cases where one bond of the plaquette is identical with the bond from (00) to (10) (marked c). On the other hand we have six new possibilities as shown in the figure (marked d), so that the numerator yields

$$\text{numerator}/2^N = t + 2t^3 + (N-2+6)t^5 + O(t^7) \tag{6.10}$$

ergibt. Die Entwicklung nach Potenzen von t ergibt

. Expanding now in powers of t one obtains

$$\langle S(00)S(10)\rangle = \frac{t + 2t^3 + (N-2+6)t^5 + O(t^7)}{1 + Nt^4 + O(t^6)} = t + 2t^3 + 4t^5 + O(t^7). \tag{6.11}$$

Ähnlich erhält man $\langle S(00)S(20)\rangle = t^2 + O(t^4)$ und $\langle S(00)S(11)\rangle = 2t^2 + O(t^4)$. Offensichtlich wird die Entwicklung komplizierter, wenn man mit $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ arbeitet, wobei die $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ n-komponentige Vektoren mit der Einschränkung $\sum_\alpha S_\alpha^2(\mathbf{r}) = 1$ sind, aber auch für solche Systeme wurden Entwicklungen durchgeführt. Wir werden uns nicht weiter mit diesen Techniken befassen, aber bis Wilson's Ideen erschienen, gaben diese die besten Ergebnisse. Sie geben auch heute noch Ergebnisse vergleichbarer Präzision. Der einzige Nachteil dieses Verfahrens besteht darin, dass es nicht hilft, kritische Phänomene zu *verstehen.*

Similarly one obtains $\langle S(00)S(20)\rangle = t^2 + O(t^4)$ and $\langle S(00)S(11)\rangle = 2t^2 + O(t^4)$. Obviously the expansions are more complicated if we work with $\mathbf{S}(\mathbf{r})$, where the $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ are n-component vectors with the restriction $\sum_\alpha S_\alpha^2(\mathbf{r}) = 1$, but also for such systems expansions have been performed. We will not look into this technique more, but until Wilson's ideas appeared these expansions yielded the best results. But they still yield results of comparable precision. The only drawback of this procedure is, that it does not help *understanding* critical phenomena.