Ising-Modell (NN-Wechselwirkung) - kritische Temperaturen

dim	lattice	q	$k_B T_c/J$	$k_B T_c/Jq$
1	chain/ring	2	0	0
2	honeycomb	3	~1.52	~0.5
	square	4	2.269	0.57
	triangular	6	~3.64	~0.61
3	diamond	4	~2.704	~0.68
	cubic	6	~4.512	~0.75
	bcc	8	~6.35	~0.79
	fcc	12	~9.79	~0.82
4	hypercubic	8	~6.68	~0.84
∞	"	∞	∞	1.0

Most values taken from Peter Meyer, PhD thesis, University of Derby (2000) http://www.hermetic.ch/compsci/thesis/chap7.htm

Note:
- phase transition for all lattices in $d>1$
- $T_c \xrightarrow{q\to\infty} Jq/k_B$ (coordination number q)

Kritische Exponenten des Ising-Modells in $d=3$

$\alpha = 0.110(1)$; $\beta = 0.3265(3)$; $\gamma = 1.2372(5)$;
$\delta = 4.789(2)$; $\nu = 0.6301(4)$; $\eta = 0.0364(5)$; $\omega = 0.84(4)$

Pelissetto, Vicari, Physics Reports 368, 549 (2002) http://arxiv.org/abs/cond-mat/0012164
http://dx.doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00219-3

(zum Vergleich: mean field, d.h. $d\geq 4$: $\alpha=0$, $\beta=\frac{1}{2}$, $\gamma=1$,
$\nu=\frac{1}{2}$ und nochmal $d=2$: $\alpha=0$, $\beta=\frac{1}{8}$, $\gamma=\frac{7}{4}$, $\delta=15$)

I.5 Finite-size scaling

Ziel des finite-size scaling (FSS) ist die Extrapolation des kritischen Verhaltens im thermodynamischen Limes aus den (nichtsingulären) Eigenschaften endlicher Systeme.

Grundhypothese: für den singulären Anteil der Freien Energie ist nahe dem Phasenübergang 2. Ordnung die relevante Längenskala durch die Korrelationslänge ξ gegeben, nicht durch mikroskopische Längenskalen (mittlerer Teilchenabstand, Gitterperiode etc.). Charakteristisch für die Größe eines hyperkubischen Systems mit Volumen $V = L^d$ ist also das Verhältnis L/ξ von Ausdehnung zu Korrelationslänge und es gilt für die Dichte (des singulären Anteils) der Freien Energie in führender Ordnung:

$$f^{(s)}(L,T) = \frac{1}{V} F^{(s)}(L,T) \approx \frac{1}{V} \tilde{Y}\left(\frac{L}{\xi(T)}\right), \quad \text{wobei}$$

$$\xi(T) = \xi_0\, \varepsilon^{-\nu}; \qquad \varepsilon = \left|1 - \frac{T}{T_c}\right|$$

$\Rightarrow$ dimensionslose Länge $\quad \frac{L}{\xi} = \xi_0^{-1} \varepsilon^{\nu} L$

Reskalierung: $\quad \left(\frac{L}{\xi} \frac{\xi_0}{L_0}\right)^{1/\nu} = \varepsilon \left(\frac{L}{L_0}\right)^{\frac{1}{\nu}}$ mikroskopische Längenskala, häufig $L_0 = 1$

$$\Rightarrow \quad f^{(s)}(L,T) \approx L^{-d}\, Y(\underbrace{C_1}_{\text{nonuniversal}}, \varepsilon L^{1/\nu}, 0)$$

Y: universal function

Für die Kopplung an das Magnetfeld nimmt man an, dass dieses effektiv durch eine Potenz von ξ verstärkt wird, da (für das ferromagnetische Modell) Bereiche mit Radius ξ schon nahezu parallel ausgerichtet sind:

$$\Rightarrow \boxed{f^{(s)}(L,T,B) = L^{-d}\, Y\left[C_1 \varepsilon L^{1/\nu},\; C_2 B L^{\frac{\beta+\gamma}{\nu}}\right]}$$

V. Privman, M. E. Fisher, PRB 30, 322 (1984) http://prola.aps.org/abstract/PRB/v30/i1/p322_1

Dabei sind alle Exponenten und die Funktion Y nur von der Universalitätsklasse abhängig (insbesondere von den Dimensionen von Raum und Ordnungsparameter).

Es lassen sich nun Skalierungsgleichungen für die Observablen ableiten, z.B. (geschrieben für $L_0 \equiv 1$):

$$M(L,T) = \tilde{M}(\varepsilon L^{1/\nu})\, L^{-\beta/\nu}$$

$$\chi(L,T) = \tilde{\chi}(\varepsilon L^{1/\nu})\, L^{\gamma/\nu}$$

$$C(L,T) = \tilde{C}(\varepsilon L^{1/\nu})\, L^{\alpha/\nu}$$

Hier wurden teilweise Skalenbeziehungen zwischen den Exponenten benutzt:

$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ Rushbrooke $\qquad \gamma = \beta(\delta - 1)$ Widom

$d\nu = 2 - \alpha$ Josephson $\qquad \gamma = \nu(2-\eta)$ Fisher

Die Funktionen $\tilde{M}$, $\tilde{\chi}$, $\tilde{C}$ etc. lassen sich wiederum durch Ableitungen der universellen Funktion Y und die nichtuniversellen Koeffizienten C_1, C_2 ausdrücken.

Beachte: (i) die Skalengesetze gelten nur asymptotisch für $\varepsilon \to 0$ und $B \to 0$, in der Praxis können die Korrekturen (corrections to scaling) signifikant sein.
(ii) Im Allgemeinen kommen noch reguläre Anteile hinzu.
(iii) Phasenübergänge 1. Ordnung erfordern weitergehende Analyse.

Praktische Anwendung: Um kritische Exponenten zu testen und nichtuniverselle Koeffizienten zu bestimmen, müsste man laut FSS skalierte Observablen gegen skalierte Parameter auftragen, z.B.

$$\tilde{M}_L(x), \text{ wobei } \tilde{M}_L = M_L L^{\beta/\nu}; \quad x = \varepsilon L^{1/\nu}$$

Dabei sollten die Kurven asymptotisch kollabieren:
$\tilde{M}(x) = \lim_{L\to\infty} \tilde{M}_L(x)$ (jeweils separat für $T<T_c$ und $T>T_c$.

Problem: (i) die Abbildung $T \to \varepsilon = |1-\frac{T}{T_c}|$ erfordert die Kenntnis von T_c (nichtuniversell); (ii) Exponenten i.A. unbekannt oder nur ungenau bekannt.

Lösung: Bestimme T_c aus Observablen, deren Betrag nicht von L renormiert wird, die also nur im Argument von L abhängen. Beispiel: aus

$$\langle m^2 \rangle \propto \left(L^d L^{-\beta/\nu}\right)^2 \quad \text{und} \quad \langle m^4 \rangle \propto \left(L^d L^{-\beta/\nu}\right)^4$$

$m = L^d M$

konstruiere skalierungsfreien Quotienten

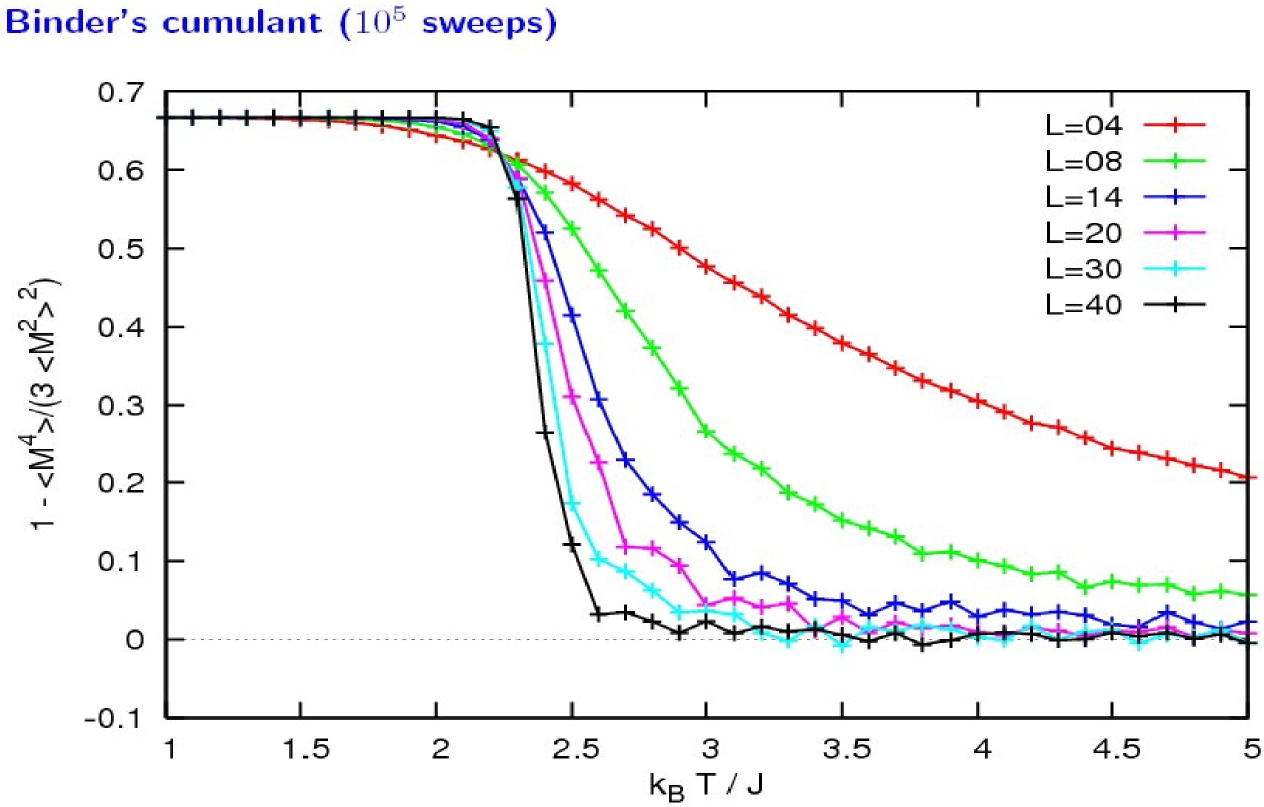
$$\frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \propto \left(L^{d-\frac{\beta}{\nu}}\right)^{4-2\cdot 2} = L^0$$

bzw. die Binder-Kumulante $U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle}$ mit

$$U_4(L,T) = \tilde{U}_4(x)$$

Trägt man nun Kurven $U_4(T)$ für verschiedenes L gemeinsam auf, schneiden sich diese asymptotisch für $T=T_c$ (und werden abseits mit verschiedenen Faktoren L

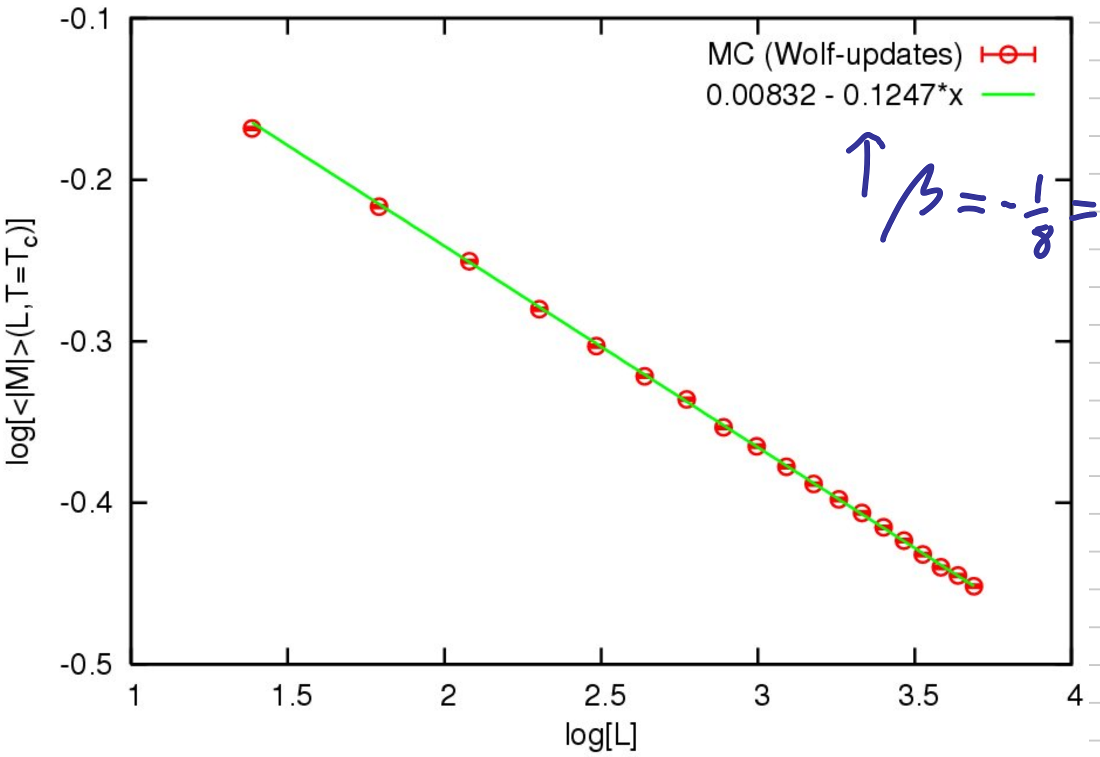
horizontal gedehnt. Beispiel für 2D Ising-Modell:



Es gilt:

$$U_4 \xrightarrow{L\to\infty} \begin{cases} \frac{2}{3} & \text{für } T<T_c \\ U^* \approx 0.61 & \text{" } T=T_c \\ 0 & \text{" } T>T_c \end{cases}$$

Sobald T_c bekannt ist, können Exponenten z. B. aus logarithmischen Auftragungen bestimmt werden, hier für β:



$\uparrow \beta = -\frac{1}{8} = -0.125$

http://komet337.physik.uni-mainz.de/Bluemer/Scripts/num-meth-ss07-v06.pdf