

JAHRBUCH
DER
UNIVERSITÄT AUGSBURG

1988



Universität Augsburg
1989

PHASENÜBERGÄNGE UND RENORMIERUNG IN DER PHYSIK

PETER HÄNGGI

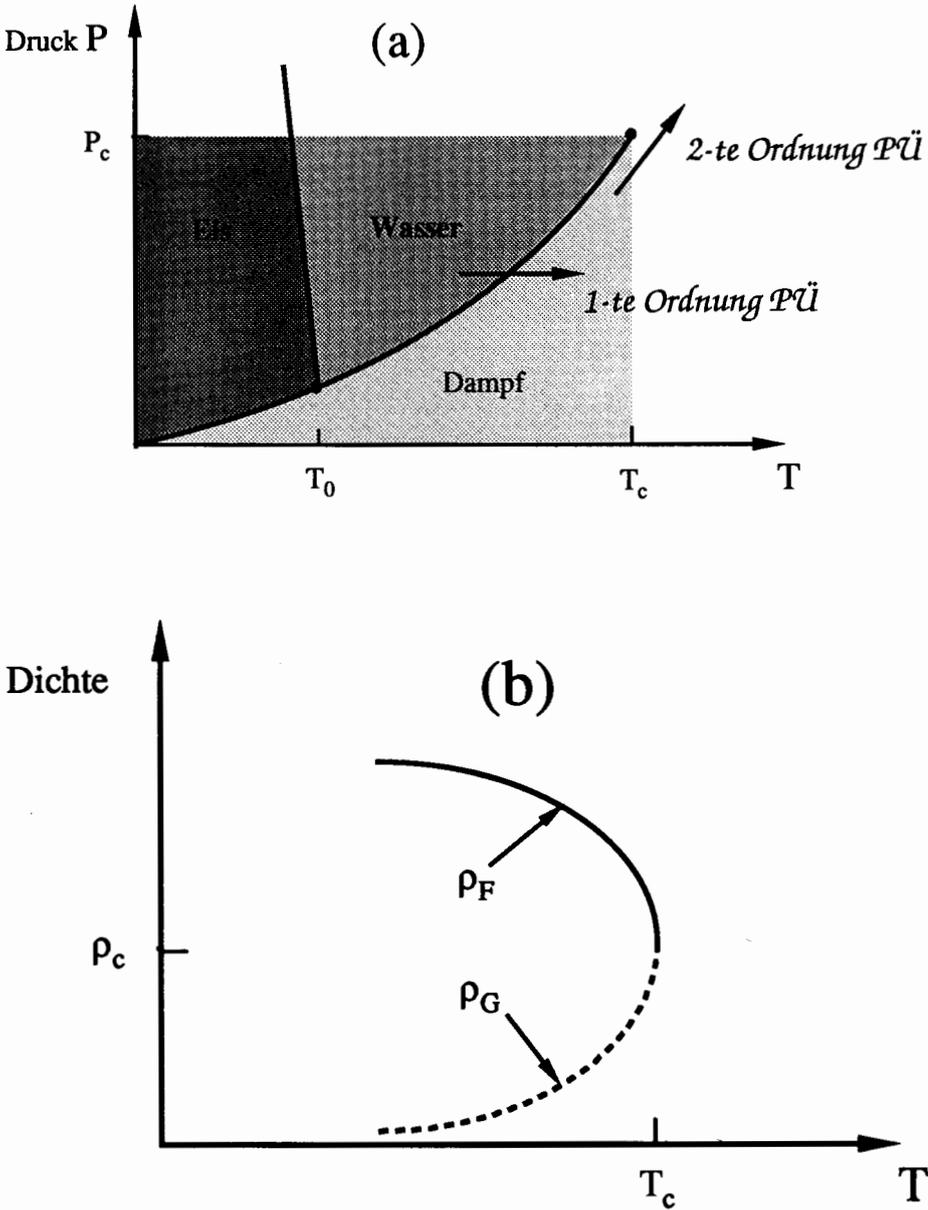
Mit Phasenübergängen und kritischem Verhalten von physikalischen Systemen, wie sie etwa in Flüssigkeiten beim Übergang gasförmig \rightarrow flüssig, flüssig \rightarrow fest, oder in magnetischen Werkstoffen und Legierungen auftreten, beschäftigen sich Physiker seit über 100 Jahren. Ein Teil der Geschichte sowie die Grundideen der Theorie für kritisches Verhalten von Materialien sollen hier im folgenden näher skizziert werden.

In den Vorlesungen für Physiker begegnet man bedeutenden Forschern wie Newton, Einstein, Maxwell und Bohr als den Wegbereitern für die Entdeckung neuer fundamentaler Naturgesetze. Innerhalb der Physik gibt es nämlich nur vier fundamentale Wechselwirkungen (Gravitationskraft, elektrische Kraft sowie die „Schwachen“ und „Starke“ Kräfte im Mikrokosmos, die den Aufbau der Atome bestimmen), mittels derer eigentlich *alle* Phänomene der Natur erklärbar sein müßten. Betrachtet man Physik aber ausschließlich nur als die Wissenschaft für das Fundamentale, dann ist die Zukunft für Physiker, sowie für die Physik selbst, wohl eher zum Bankrott verurteilt. Viel erfolgversprechender ist da schon eine Auffassung, in der Physik auch als die Wissenschaft verstanden wird, die die *Naturphänomene mittels mathematischer und numerischer Methoden zu beschreiben vermag*. Selbst wenn man die Grundgleichungen der Mechanik sowie die Grundprinzipien der statistischen Mechanik sehr genau kennt, versteht man deshalb noch lange nicht die Vielfalt aller möglichen Phänomene, die erst durch das Zusammenwirken vieler Teilchen ermöglicht werden. Dazu bedarf es vieler Einsichten und Ideen, die oft erst von anderen Zweigen der Physik oder auch der Mathematik übertragen werden müssen. Umgekehrt entwickelt sich daraus ein Nährboden für weitere Fortschritte innerhalb und zwischen den Gebieten mit Berührungspunkten von Physik und Mathematik. Dieses Wechselspiel wird sehr deutlich am Beispiel der Entwicklung der Theorie für die Phasenübergänge.

Klassische Periode von Van der Waals bis Landau

Das Studium der Relationen zwischen Gasen und Flüssigkeiten war ein Gegenstand großer Forschungsaktivitäten in der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts. Ähnlich, wie man aus der täglichen Erfahrung den Übergang von Wasser zu Eis bei $T_E = 0^\circ\text{C}$ (bei einer Atmosphäre Außendruck) schon lange kennt, beobachtet man auch, daß die flüssige Phase ab einer gewissen Temperatur $T_c = 374^\circ\text{C}$ und Druck $P_c = 218$ Atmosphären kontinuierlich in die Gasphase übergeht (Fig. 1). Insbesondere ist die gasförmige und die flüssige Phase in einem Druck-Temperatur-Diagramm durch die Koexistenzkurve getrennt (siehe Fig. 1[a]). Längs dieser Kurve sind beide Phasen im Gleichgewicht. Der Tripelpunkt bei $T_0 = 0.0098^\circ\text{C}$ und 0.0060 Atmosphären, in dem Eis – Wasser – Dampf im Gleichgewicht sind, liegt also leicht über dem Gefrierpunkt T_E . Mit steigender Temperatur nimmt die Differenz der Dichte zwischen den beiden Phasen ab, bis sie am Endpunkt, dem „kritischen Punkt“ mit Temperatur $T = T_c$, kontinuierlich verschwindet (siehe Fig. 1[b]). Für Temperaturen größer als T_c existiert dann nur noch die Gasphase.

Van der Waals gab in seiner Dissertation von 1873 erstmals eine Zustandsgleichung an, die zusammen mit der sogenannten Maxwell-Konstruktion ein derartiges Verhalten



Figur 1: (a) Koexistenzkurve der festen, flüssigen und gasförmigen Phasen von Wasser mit dem kritischen Punkt gegeben bei Temperatur T_c und Druck P_c . Der waagrechte Pfeil in (a) kennzeichnet einen Phasenübergang (PÜ) erster Ordnung mit endlichem Sprung in der Dichte, während der Pfeil tangential zur kritischen Koexistenzlinie den Phasenübergang zweiter Ordnung bei (T_c, P_c) kennzeichnet, in dem sich jetzt die Dichte beim Übergang kontinuierlich ändert, d. h. $\rho_F - \rho_G \sim |T_c - T|^{+\beta}$, $\beta > 0$. (b) Dichte der Flüssigkeit ρ_F (oberer Zweig) und des Gases, ρ_G , (unterer, gestrichelter Zweig) entlang der Koexistenzkurve in 1(a).

beschreibt. Danach gilt für die Differenz zwischen Dichte ρ und ihrem kritischen Wert ρ_c , d. h. dem „Ordnungsparameter“, ein Verhalten

$$(\rho - \rho_c) \sim \pm (T_c - T)^\beta$$

mit (+) für die flüssige und (-) die gasförmige Phase. Der „kritische Exponent“, β , ergibt sich auf Grund der Van der Waals-Theorie zu $\beta = 1/2$. Die Wichtigkeit der Arbeit von Van der Waals hat Maxwell historisch sofort erkannt. So schreibt er in einem Vortrag im Jahre 1875 für die Chemische Gesellschaft:

„The molecular theory of the continuity of the liquid and gaseous states forms the subject of an exceedingly ingenious thesis by Mr. Johannes Diderick van der Waals, a graduate of Leyden. There are certain points in which I think he has fallen into mathematical errors, and his final result is certainly not a complete expression for the interaction of real molecules, but his attack on this difficult question is so able and so brave, that it cannot fail to give a notable impulse to molecular science. It has certainly directed the attention of more than one inquirer to the study of the Low-Dutch Language in which it is written.“

Des weiteren hat Einstein im Jahre 1910 gezeigt, daß für die Dichteschwankungen $\langle \Delta \rho^2 \rangle$, folgender Zusammenhang besteht

$$\langle \Delta \rho^2 \rangle = \frac{\rho^2 k T}{V} \kappa_T,$$

wobei V das Volumen, k die Boltzmannsche Konstante, und κ_T die isotherme Kompressibilität bedeuten. Dabei hat Einstein jedoch stillschweigend vorausgesetzt, daß die Schwankungen in verschiedenen Volumenelementen statistisch unabhängig voneinander vorkommen. Die Van der Waals-Theorie sagt nun für die isotherme Kompressibilität (allgemeiner die Suszeptibilität) eine kritische Divergenz der Form

$$\kappa_T = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right) \sim |T - T_c|^{-\gamma}$$

voraus, wobei $\gamma = 1$ und P den Druck bedeutet. Daraus berechnete Einstein, daß die Lichtstreuung in der Flüssigkeit proportional zu $\kappa_T \lambda^4$ (Rayleigh-Verhalten) ist, und deshalb am kritischen Punkt nach unendlich geht. Am kritischen Punkt bewirken die Dichteschwankungen eine „kritische Opaleszenz“, d. h. eine milchig-trübe Brechung des einfallenden Lichtes. Auf eine innere Inkonsistenz dieser Einsteinschen Analyse haben 1914 schon Ornstein und Zernike hingewiesen. In einer etwas obskuren und nur schwer verständlichen Arbeit wiesen diese Autoren darauf hin, daß die Korrelationen der Dichtefluktuationen nicht null sind, sondern exponentiell abfallen, wie

$$\frac{1}{r} \exp(-r/\xi),$$

wobei die Korrelationslänge ξ selbst kritisch wird, d. h.

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$$

mit $\nu = 1/2$. Die Dichtefluktuationen fallen im kritischen Punkt also nicht mehr exponentiell, sondern proportional zu $1/r$ ab. Dies führt dazu, wie auch experimentell beobachtet wird, daß die Streuung des Lichtes am kritischen Punkt nicht dem Rayleighschen Gesetz, d. h. proportional λ^{-4} , sondern stärker, proportional λ^{-2} , zunimmt. Das

herausragende physikalische Konzept in der Arbeit von Ornstein und Zernike war also die Erkenntnis, daß *kurzreichweitige* molekulare Kräfte durchaus *langreichweitige Ordnung* erzeugen können (unendliche Korrelationslänge). Zu Anfang des 20. Jahrhunderts wurde ähnlich kritisches Verhalten an vielen anderen Systemen, so zum Beispiel in Ferromagneten, binären Legierungen und flüssigem Helium beobachtet. Landau hat dann 1937 erstmals eine vereinheitlichte, aber rein *phänomenologische Theorie* aufgestellt, in der man annimmt, daß die sogenannte thermodynamische freie Energie F (d. h. die Energie als Funktion von Volumen und Temperatur bei konstanter Teilchenzahl N) am kritischen Punkt analytisch ist. Damit ist F in eine Taylorreihe in Potenzen des Ordnungsparameters der Phase entwickelbar. Diese („mittlere Feld“) Theorie liefert für alle Phasenübergänge zweiter Ordnung, d. h. Übergänge mit kontinuierlicher Veränderung des Ordnungsparameters (erster Ordnung wäre ein Übergang mit unstetiger Änderung des Ordnungsparameters bei $T = T_c$, siehe Figur 1) dieselben kritischen Exponenten

$$\gamma_L = 1, \beta_L = 1/2, \nu_L = 1/2.$$

Diese Theorie umfaßt alle früheren spezielleren Theorien von Van der Waals (1873) für Gase, von Weiss (1907) für den Ferromagnetismus sowie die von Gorsky (1928), Dehlinger (1930), Borelius (1934) und Bragg und Williams (1935) für Legierungen. Mit anderen Worten, die Landau-Theorie beschreibt das gleiche kritische Verhalten für all diese Systeme, obwohl die entsprechenden Materialgleichungen ganz unterschiedliches Aussehen haben.

Die Revolution durch Onsager

Schon kurz vor der Jahrhundertwende hat man Beobachtungen in einer Flüssigkeit angestellt, die mit dem vorausgesagten Verhalten der Van der Waals-Theorie (d. h. $\beta = 0.5$) nicht im Einklang waren. So schreibt der Physiker Verschaffelt im Jahre 1900:

„Gegenseitig können keine experimentellen Beweise gegeben werden, daß bis zur unmittelbaren Umgebung des kritischen Punktes $Q_F - Q_G = A |T - T_c|^{0.3}$ nicht gelten würde an Stelle der theoretischen Formel $Q_F - Q_G = A |T - T_c|^{0.5}$.“

Diese Arbeit wurde aber zunächst nur wenig beachtet. Das Rätsel, wie kritische Exponenten und das kritische Verhalten *fundamental* zu erklären sind, blieb lange Zeit bestehen. Die Zeit war für eine solche Erklärung einfach noch nicht reif. Zudem zog die aufkommende Quantentheorie die Physiker in ihren Bann. Die Ausnahme am Interesse für kritische Phänomene bildeten zu jener Zeit ein paar wenige, aber wichtige Arbeiten, wie die von Lenz und Ising (1925) zum Ferromagnetismus sowie natürlich die oben erläuterte phänomenologische Theorie von Landau.

Eine dramatische Wende setzte um die vierziger Jahre ein. Im Jahre 1941 äußerten die Physiker Kramers und der aus Basel stammende Wannier die Vermutung, daß die spezifische Wärme nicht wie von der Landau-Theorie vorausgesagt bei T_c einen Sprung macht, dafür aber logarithmisch divergiert. Im Jahre 1944 hat dann Onsager eine exakte Lösung für das zwei-dimensionale Ising-Modell (ohne äußeres Magnetfeld) publiziert. Darin wurde gezeigt, daß die freie Energie F als Funktion der Zustandssumme

$$Z = \exp\left(-\frac{F}{kT}\right), \text{ d. h.}$$

$$F \equiv -kT \ln Z ,$$

im *thermodynamischen Limes* (Teilchenzahl $N \rightarrow \infty$, Volume $V \rightarrow \infty$, $\frac{N}{V} = \text{const}$) eine Singularität besitzt. Die freie Energie ist also nicht analytisch bei $T = T_c$. Mit anderen Worten, eine Entwicklung der freien Energie à la Landau existiert streng genommen nicht. In nachfolgenden Arbeiten von Onsager und Mitarbeitern sowie von Yang, hat man die kritischen Exponenten für dieses realistische zweidimensionale Modell exakt bestimmt. Man findet, daß die spezifische Wärme in der Tat logarithmisch divergiert, bzw. die *exakten Werte* für die kritischen Exponenten

$$\gamma_0 = 7/4, \quad \beta_0 = 1/8 \text{ und } \nu_0 = 1$$

für dieses Modell von den Werten der Landau-Theorie erheblich abweichen. Dieses Resultat war natürlich ein schwerer Schlag für alle klassischen Theorien vom Typ nach Van der Waals, Weiss und Landau. In den fünfziger Jahren hat man dann mittels verschiedener mathematischer asymptotischer Methoden und Näherungen, wie der Padé-Approximation, und während der siebziger Jahre mittels der Boreltransformierten, entscheidende Fortschritte für eine Vielfalt von realistischen, auch dreidimensionalen Modellen erzielt. Insbesondere hat man zusammen mit neueren experimentellen Messungen gewisse Regelmäßigkeiten gesehen. So beobachtet man, daß die kritischen Exponenten bei kontinuierlichen Phasenübergängen (im *Gegensatz* zu diskontinuierlichen Phasenübergängen erster Ordnung) ein *universelles Verhalten* zeigen, d. h., daß die kritischen Werte für viele verschiedene Materialien dieselben sind. Die kritischen Exponenten $\{\gamma, \beta, \nu\}$ (und andere) hängen dabei nur von den „globalen“ Eigenschaften wie

- (i) Raumdimension d , $1 < d \leq 4$ [für $d > 4$ gelten für $\{\gamma, \beta, \nu\}$ die Landau-Werte, und für $d \leq 1$ gibt es keine Phasenübergänge],
- (ii) Komponentenzahl n für den Vektor der Wechselwirkung,
- (iii) Symmetrie und der Reichweite dieser Wechselwirkung,

ab.

Die Exponenten sind aber weiter nicht von den Einzelheiten des Systems abhängig, wie z. B. der Gitterstruktur, etc. Auf Grund dieser Beobachtungen hat 1965 Widom die *Homogenitätsannahme* eingeführt. Danach kann der Anteil der freien Energie F , der das kritische Verhalten bestimmt, geschrieben werden als

$$F = |T - T_c|^{2-\alpha} f(h |T - T_c|^{-\Delta}), \quad \Delta = 2 - \alpha - \beta$$

worin h das symmetriebrechende Feld (z. B. das Magnetfeld im ferromagnetischen Fall oder den Druck im Falle von Flüssigkeiten) darstellt. Diese Annahme führt dann zwanglos auf einen Zusammenhang zwischen den kritischen Exponenten, der sich in der Form von sogenannten Skalenrelationen ausdrücken läßt. Mit dem kritischen Exponenten α für die Divergenz der spezifischen Wärme

$$C_v \sim |T - T_c|^{-\alpha}$$

gilt dann beispielsweise

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2.$$

Dieselbe Relation gilt natürlich für die Landau-Exponenten mit $\alpha_L = 0$, $\beta_L = 1/2$, $\gamma_L = 1$ und die zwei-dimensionalen Onsager-Werte $\alpha_o = 0$, $\beta_o = 1/8$, $\gamma_o = 7/4$. In dreidimensionalen Systemen mit $n = 1$ findet man mit $\gamma \sim 5/4$, $\beta \sim 5/16$ für die Divergenz der spezifischen Wärme $C_v \sim |T - T_c|^{-0.1}$, d. h. $\alpha \sim 0.1$.

Im nachhinein muß auch festgestellt werden, daß Onsager mit seiner exakten Lösung für das zweidimensionale Ising-Modell mit $d = 2$, $n = 1$ doch auch Glück gehabt hat. In anderen Fällen gibt es für $d = 2$ mit $n > 2$ (und natürlich für $d = 1$, $n \geq 1$) nämlich überhaupt keine Phasenübergänge (Polyakov 1975; Brezin 1976), d. h. der Übergang wird mittels starker Fluktuationen unterdrückt. Der sehr merkwürdige Fall mit $d = 2$, $n = 2$ (X - Y Modell) ist bis heute noch umstritten.

Die Renormierung

Das fundamentale Problem besteht nun darin, die phänomenologische Homogenitätsannahme und die Universalität im Detail zu verstehen. Insbesondere muß eine neue, quantitative Theorie gleichzeitig zwei Probleme lösen:

1. Wie kann man die kritischen Exponenten α , β , γ , ν , ... etc. praktisch berechnen?
2. Wie kann man die experimentell beobachtete Universalität dieser Exponenten sowie die Skalenrelationen erklären?

Die Methode der *Renormierung* liefert nun sowohl eine *Erklärung* für die Universalität als auch eine praktische Methode zur *Berechnung* von kritischen Exponenten. Die Renormierung ist ganz auf die besonderen Verhältnisse am kritischen Punkt ausgerichtet. Wie vorhergehend schon erläutert, geht am kritischen Punkt die Kohärenzlänge nach unendlich. Der kritische Punkt ist deshalb durch eine Invarianz gegenüber Skalentransformationen ausgezeichnet. Für die Phasenübergänge wurde diese Idee erstmals von Kadanoff (1966) konkretisiert. Die Idee ist dabei die folgende: Die Energiefunktion (Hamiltonfunktion) H des Systems wird transformiert bzw. „renormiert“ (R)

$$H' = R[H], \text{ bzw. } \exp\left(-\frac{H'}{kT}\right) \equiv \text{Spur}_{N-N'} \left\{ \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) \right\}. \quad (\text{R1})$$

Die Renormierung transformiert dabei die ursprüngliche Hamiltonfunktion mit N Freiheitsgraden in eine neue mit nur noch N' Freiheitsgraden, wo $N' = N/b^d$. Dabei ist $b > 1$ der Skalierungsfaktor der Renormierung, und d bedeutet die Raumdimension. Diese im allgemeinen nichtlineare Transformation ist dabei so zu wählen, daß die Zustandssumme, $Z = \int \exp(-\beta H) dr^N dp^N$, dabei invariant bleibt. Die entscheidende Bedingung ist also

$$Z_{N'}[H'] = Z_N[H]. \quad (\text{R2})$$

Dieses „*Ausdünnen der Freiheitsgrade*“ bewirkt nun sowohl eine Änderung der Längenskala $x \rightarrow x' = x/b$ und der Impulse $p \rightarrow p' = bp$ sowie eine Änderung der Parameter der Wechselwirkung. Die Operation in (R1) nennt man die „Renormierungsgruppe“, da R mathematisch eine Halbgruppe bildet. Das Wort „Renormierung“ kommt von der Prozedur, bei der man die Wechselwirkung der irrelevanten $(N - N')$ alten Freiheitsgrade in effektive Wechselwirkungen unter den verbleibenden N'

intermolekularen Kräfte in der Natur natürlich nicht gilt – die Landau-Theorie bzw. die klassischen Theorien richtig werden. Wilson und andere wiesen auch darauf hin, daß das Problem der kritischen Phänomene auf das Engste mit der Renormierung der (Ultraviolett-)Divergenzen in der Feldtheorie zusammenhängt. Dort wurden ähnliche Ideen für eine solche Renormierung schon 1953 von Stückelberg und Petermann skizziert. Damit konnte Wilson den technisch hochentwickelten Kalkül der feldtheoretischen Renormierung auf kritische Phänomene anwenden. Er ging dabei zurück auf die Ideen von Landau, indem er die Landausche freie Energie nicht makroskopisch, dafür aber jetzt *mikroskopisch*, entsprechend der Ginzburg-Landau-Formulierung für Supraleiter auffaßte. Unter den Experten gab es damals kaum jemand, der ein solches Verfahren für ausreichend gehalten hätte, nichtklassische von der Landau-Theorie verschiedene Resultate zu erhalten; – zu sehr noch saß der Schock des Versagens der Landau-Theorie in den Knochen der älteren Experten. Dabei konnte nun Wilson zeigen, daß Korrekturen zur freien Energie als Funktion des mikroskopischen Ordnungsparameters s von Ordnung größer als vier nichtrelevante Beiträge (d. h. $\lambda_i < 1$) zum Fixpunkt-Verhalten von H^* liefern. Die *makroskopische* Formulierung von Landau ist deshalb nicht richtig, weil die dazugehörige Zustandssumme Z , gemittelt über eine Region der Länge L , durch eine einzige Konfiguration des Ordnungsparameters ausgedrückt wird, die die freie Energie minimalisiert. Dabei berücksichtigt die klassische Theorie von Landau jedoch nicht, daß die Parameter in der makroskopischen Theorie für die Landausche freie Energie *nichtanalytisch* von der Längen-Skala L abhängen! Die Erfolge der Renormierung haben in letzter Zeit auch die Behandlung vieler anderer Probleme entscheidend beeinflußt. Neben der Beschreibung von kontinuierlichen Phasenübergängen im thermischen Gleichgewicht wurden diese Ideen auch auf andere kritische Phänomene angewandt, wie z. B.:

- Behandlung von kritischen, zeitabhängigen Eigenschaften,
 - Beschreibung von kritischem Verhalten in stationären Nichtgleichgewichtssituationen,
 - Problem der Lokalisierung,
 - Nichtlineare Dynamik (deterministisches Chaos),
 - Studium von fraktalen Phasengrenzen in der komplexen Temperaturebene,
 - Dissipatives Tunneln und Kohärenz in makroskopischen Quantensystemen,
- etc..

Abschließend wollen wir aber dennoch auch anmerken, daß die großen Erfolge auf dem Gebiet der kritischen Phänomene nicht allein der Renormierung zuzuschreiben sind. Dreiundzwanzig Jahre nach Onsager hatte Lieb 1967 die Klasse der exakt lösbaren zweidimensionalen Systeme um das F-Modell erweitert, und Baxter gelang 1971 die Lösung des Acht-Vertex-Modells, das alle bislang bekannten Fälle als Spezialfälle einschloß. Die Lösung zweidimensionaler Systeme wurde seither entscheidend erweitert unter Zuhilfenahme der Methode der „konformen Invarianz“, einer Methode, in der die Mathematik der konformen Gruppe in d Dimensionen mit der Skaleninvarianz bei kurzreichweitigen Wechselwirkungen kombiniert wird.

Zusammenfassend kann man sagen, daß ein ständiges Wechselspiel zwischen mathematischen Erkenntnissen und physikalischen Methoden aus unterschiedlichen Gebieten die Entwicklung der Phasenübergänge entscheidend beeinflußt hat, und umgekehrt die verschiedenen Zweige der Mathematik und Physik wohl auch weiterhin in der Zukunft befruchten wird.