

7. Topologische Phasenübergänge ((Berezinskii-) Kosterlitz-Thouless PÜ)

7.1 Einführung

- Molekularfeldtheorien beschreiben die kritischen Phänomene gut für $d > d_c$ (**obere kritische Dimension**)
- Verringert man die Raumdimension d , so werden die Effekte der Wechselwirkung zwischen einem Spin und seinen Nachbarn geringer (vor allem durch die abnehmende Zahl nächster Nachbarn) und ab einer sogenannten **unteren kritischen Dimension** d_{lc} verschwindet die langreichweitige Ordnung für endliche Temperaturen T
- Für Spinsysteme mit diskreten Freiheitsgraden (Ising-Modell) ist $d_{lc} = 1$ (siehe z.B. Abschätzung in Kap. 2.4.2 – Peierls-Argument)
- Spinsysteme mit kontinuierlicher Symmetrie des Ordnungsparameters (XY-Modell, Heisenberg-Modell) sind noch empfindlicher gegenüber thermischen Fluktuationen $\Rightarrow d_{lc} = 2$ (siehe Mermin-Wagner-Theorem)

Mermin-Wagner-Theorem:

Gittermodelle mit rotationssymmetrischem Ordnungsparameter zeigen für $d \leq 2$ (Dimension des Gitters) und $D \geq 2$ (Dimension des Ordnungsparameters) **keine langreichweitige Ordnung** für tiefe Temperaturen.

⇒ erwarten für $d = 2$ und $D = 2$ keinen PÜ bei endlichen Temperaturen

Aber: Numerische Berechnungen für Systeme mit $d = 2$ und $D = 2$ zeigen Eigenschaften eines PÜ
(Beispiel: Hochtemperaturentwicklung legt Divergenz der Suszeptibilität bei $T \neq 0$ nahe)

Berezinskii (1971):

Für $d = 2$ und $D = 2$ existiert ein Phasenübergang von der ungeordneten (Hochtemperatur-) Phase zu einer quasi-langreichweitigen (Tieftemperatur-) Phase.

Kosterlitz/Thouless (1972/1973):

Verallgemeinerung der Theorie von Berezinskii

⇒ es existiert ein neuer Typ von Phasenübergängen: Kosterlitz-Thouless PÜ (topologischer PÜ)

Quasi-langreichweitige Ordnung

- System ist anisotrop auf makroskopischer Skala (im Gegensatz zu Fluiden oder Gläsern), zeigt aber keine langreichweitige Ordnung (im Gegensatz zu Kristallen)
- Langsames, potenzförmiges Abklingen der Korrelationsfunktion
- Beispiele für Systeme mit quasi-langreichweitiger Ordnung:
 - Supraleitende und suprafluide Filme
 - Kristallisation von fluiden Membranen
 - **2-dimensionales XY-Spinmodell**

Bei tiefen Temperaturen befinden sich die Spins in einer quasi-langreichweitigen Phase (die mittlere Magnetisierung ist dabei für $B = 0$ gleich Null !).

Bei höheren Temperaturen wird die quasi-langreichweitige Ordnung durch topologische Effekte (**Vortizes**) zerstört.

⇒ **Topologischer Phasenübergang**

7.2 Phasenübergang im XY-Spinmodell ?

Untersuchen das Verhalten der Korrelationsfunktion im XY-Spinmodell, gegeben durch Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad \text{mit} \quad \vec{S}_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$$

Hohe Temperaturen: Entwicklung der Zustandssumme nach Potenzen von $\tilde{J} = J/k_B T$

$$\mathcal{Z} = \int_0^{2\pi} \prod_k \frac{d\theta_k}{2\pi} e^{-\beta \mathcal{H}} \approx \int_0^{2\pi} \prod_k \frac{d\theta_k}{2\pi} \prod_{\langle i,j \rangle} [1 + \tilde{J} \cos(\theta_i - \theta_j) + \mathcal{O}(\tilde{J}^2)]$$

Da gilt

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta_1}{2\pi} \cos(\theta_1 - \theta_2) = 0 \quad \text{und} \quad \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_2}{2\pi} \cos(\theta_1 - \theta_2) \cos(\theta_2 - \theta_3) = \frac{1}{2} \cos(\theta_1 - \theta_3) ,$$

folgt, nur Produkte mit geschlossenen Loops ergeben Beitrag $\neq 0$.

Hochtemperaturentwicklung für die **Korrelationsfunktion**:

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle \sim \langle \cos(\theta_0 - \theta_r) \rangle \sim \left(\frac{\tilde{J}}{2} \right)^r \sim e^{-r/\xi} \quad \text{mit} \quad \xi^{-1} = \ln(2/\tilde{J})$$

(nur Terme liefern Beitrag, die die Punkte 0 und \vec{r} verbinden, jeder Wegschritt liefert einen Faktor $\tilde{J}/2$)

\Rightarrow Exponentieller Abfall der Spin-Spin Korrelationsfunktion \Rightarrow **ungeordnete Phase**

Tiefe Temperaturen:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos \underbrace{(\theta_i - \theta_j)}_{\substack{\text{klein, da benachb.} \\ \text{Spins fast parallel}}} \approx -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{(\theta_i - \theta_j)^2}{2} \right) = \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\theta_i - \theta_j)^2 + \text{Konst.}$$

$$\xrightarrow{\theta_i \rightarrow \theta(\vec{r})} \frac{J}{2} \int d^d r |\vec{\nabla} \theta(\vec{r})|^2 + \text{Konst.}$$

(„Spinwellennäherung“)

Für die **Korrelationsfunktion** folgt

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle \sim \langle \cos(\theta_0 - \theta_r) \rangle = \langle e^{i(\theta(0) - \theta(\vec{r}))} \rangle = \dots = e^{-\frac{k_B T}{2J} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d k^2} \sin^2\left(\frac{kr}{2}\right)}$$

(hier verwendet FT von $\theta(\vec{r})$)

$$\sim \begin{cases} e^{-r/\xi} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0 & \text{für } d = 1 \Rightarrow \text{ungeordnete Phase} \\ r^{-k_B T / 2\pi J} \text{ potenzart. Abf.} & \text{für } d = 2 \Rightarrow \text{quasi - langreichw. Phase} \\ e^{-c/r} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \text{Konstante} & \text{für } d = 3 \Rightarrow \text{geordnete Phase} \end{cases}$$

⇒ Kein PÜ für 1-dimensionales XY-Modell

⇒ Ordnung-Unordnung PÜ für 3-dimensionales XY-Modell

⇒ **Korrelationslänge bei tiefen Temperaturen für $d = 2$ unendlich,**

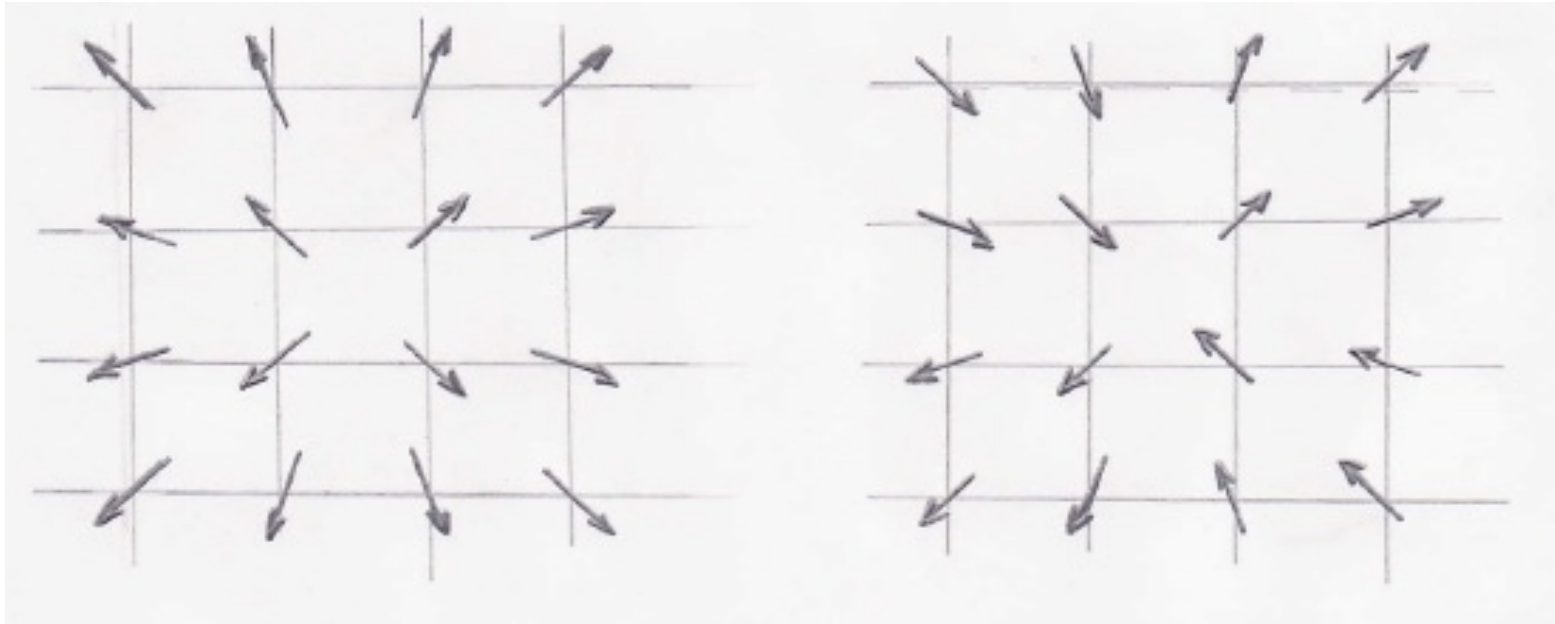
(im Unterschied zu „gewöhnl.“ PÜ, gilt jetzt das potenzförmige Verhalten der Korrelationsfunktion aber nicht nur exakt am kritischen Punkt, sondern für einen endlichen Temperaturbereich)

Was ist der Mechanismus für die Unordnung der **quasi**-langreichweitigen Ordnung (so dass z.B. Gesamtmagnetisierung = 0) in $d = 2$ und was kann die quasi-langreichweitige Ordnung zerstören?

Unordnung wird durch topologische Defekte hervorgerufen (Vortizes – Wirbel), die nicht aus kontinuierlichen Deformationen hervorgehen (und damit nicht in der Spinwellenlösung enthalten sind)

7.3 Topologische Defekte im $d = 2$ XY-Modell und der Kosterlitz-Thouless PÜ

Spins können sich so anordnen, dass Vortizes (Wirbel) entstehen



Topologische Ladung $n = +1$

Topologische Ladung $n = -1$ „Antivortex“

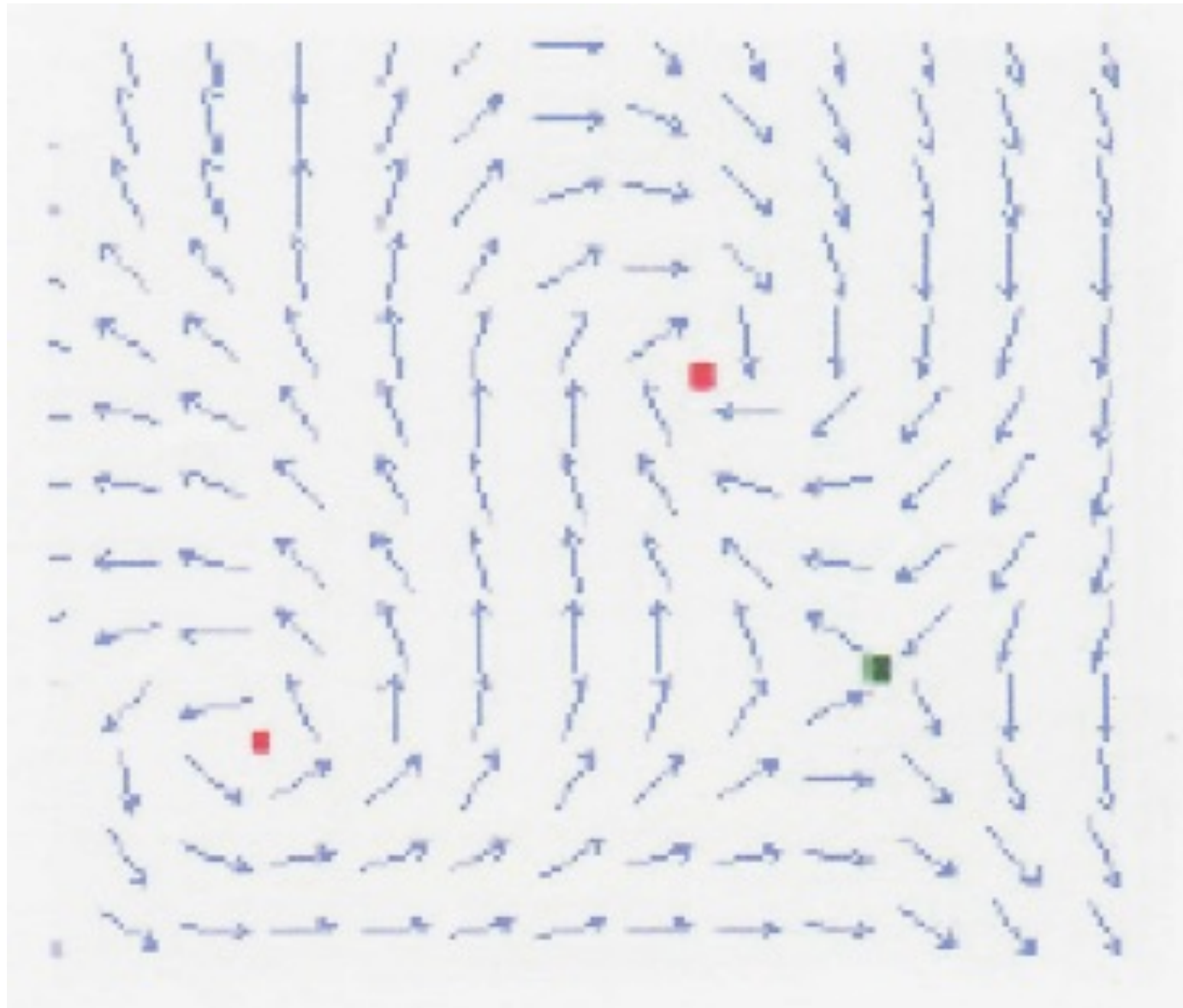
Auf einem geschlossenen Pfad um das Zentrum des Vortex gilt:

$$\oint d\vec{l} \cdot \vec{\nabla} \theta = 2\pi n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2,$$

(n beschreibt die Stärke des Wirbels = **Windungszahl**)

Durch die diskrete Natur der topologischen Ladung ist es unmöglich eine kontinuierliche Deformation zu finden, die uns den Zustand mit einem Wirbel der Ladung 1 in einen vollständig geordneten Zustand der Ladung 0 überführt \Rightarrow **n ist eine topologische Invariante.**

Beispiel für ein System mit 2 Wirbeln der Stärke +1 und einem Wirbel der Stärke -1



Wie wahrscheinlich ist es, dass solche Vortizes gebildet werden?

Energie eines einzelnen isolierten Vortex (mit $n = +1$):

$$E_1 = \frac{J}{2} \int_a^L d^2r |\vec{\nabla}\theta(\vec{r})|^2 + E_1^{(0)} = \pi J \ln(L/a) + E_1^{(0)} \approx \pi J \ln(L/a) \quad \text{Systemlänge } L, \text{ Gitterkonstante } a$$

⇒ Energie divergiert logarithmisch mit Systemgröße L

Es gibt $(L/a)^2$ mögliche Positionen für das Zentrum eines isolierten Vortex

⇒ **Entropie** $S = k_B \ln(L/a)^2$

⇒ **Freie Energie** $F = E - TS = \ln(L/a) [\pi J - 2k_B T]$

⇒ **Für $T > T_{KT} \equiv \frac{\pi J}{2k_B}$ ist das Auftreten von isolierten Vortizes thermodynamisch vorteilhaft!**

Aber Stabilitätsbetrachtung bisher unvollständig, da nur isolierte Vortizes betrachtet.

Energie eines Vortex-Antivortex-Paares (Dipol):

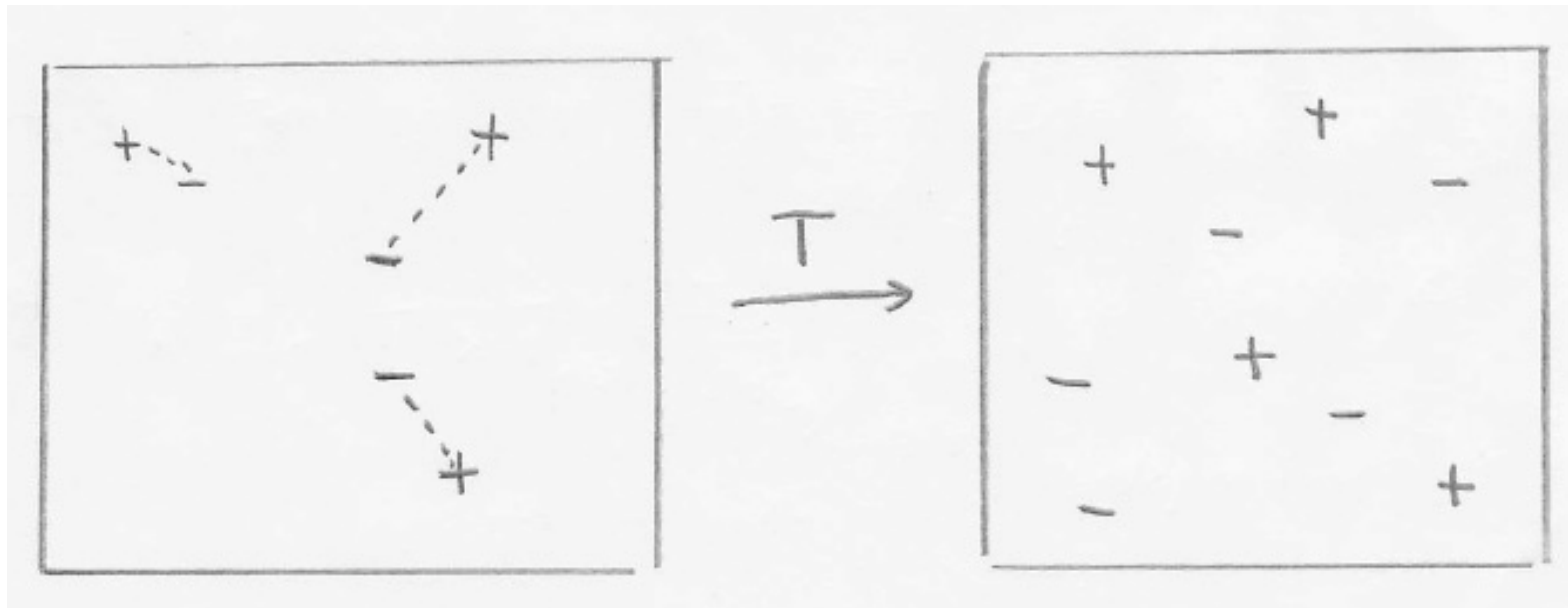
$$E_{1,-1} = 2\pi J \ln(d/a) \quad d \text{ Abstand zwischen den beiden Zentren}$$

(kleine, endliche Energie, da Spins in großer Entfernung zum Dipol kaum beeinflusst werden)

⇒ **Tiefemperaturphase: Gas von schwach gebundenen Vortex – Antivortex Paaren**

Was passiert beim Übergang zwischen Tieftemperatur- und Hochtemperaturphase?

Mit steigender Temperatur nehmen Dichte und Ausdehnung der Dipole immer weiter zu, bis bei $T = T_{KT}$ die Dichte so hoch ist, dass es keinen Sinn mehr macht, von einzelnen Dipolen zu reden, sondern nur noch von einem Gas (Plasma) freier Vortizes mit positiver oder negativer Ladung



Gas von Dipolen

$$T < T_{KT}$$

Plasma

$$T > T_{KT}$$

7.4 Besonderheiten des KT-Phasenüberganges

- Korrelationslänge

$$\begin{aligned}\xi &= \infty && \text{für alle } T < T_{KT} \\ \xi &\sim e^{c/\sqrt{T-T_{KT}}} && \text{für } T > T_{KT}\end{aligned}$$

- Freie Energiedichte (Anteil von ungebundenen Vortizes)

$$f \sim \xi^{-2} \sim e^{-2c/\sqrt{T-T_{KT}}} \quad \text{für } T > T_{KT}$$

⇒ Freie Energie und alle Ableitungen sind stetig am kritischen Punkt

⇒ PÜ „unendlicher Ordnung“ (nach Ehrenfest Klassifikation)