

# Kritisch, aber nicht universell

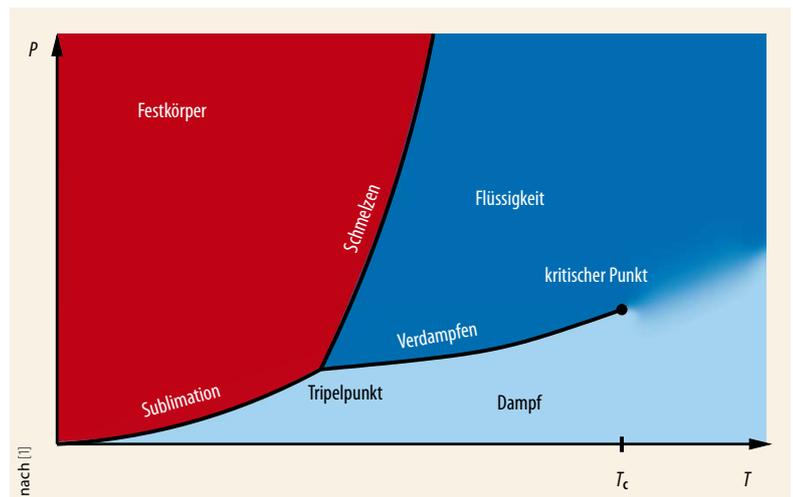
Kritische Phänomene in Festkörpern sind infolge von räumlichen Anisotropien weniger universell als gedacht.

Volker Dohm

Gasförmige und flüssige Phase einer Substanz lassen sich oberhalb einer bestimmten Temperatur nicht mehr unterscheiden. Obwohl diese kritische Temperatur für jede Substanz einen anderen Wert annimmt, weisen die kritischen Punkte gewisse universelle Eigenschaften auf, die unabhängig sind von mikroskopischen Details. Diese Universalität gilt für eine Fülle an kritischen Phänomenen in unendlich großen Systemen, egal ob sie anisotrop sind wie Festkörper oder isotrop wie Flüssigkeiten. In endlichen und anisotropen Systemen spielen, wie kürzlich gezeigt wurde, mikroskopische Details jedoch eine Rolle.

Phasenübergänge treten in vielfältiger Form in allen Bereichen der Physik der kondensierten Materie auf [1]. So hat jede Substanz feste, flüssige und gasförmige Aggregatzustände oder „Phasen“ (Abb. 1), zwischen denen Temperatur- oder Druckänderungen Übergänge induzieren können. Bekannte Beispiele für Phasenübergänge innerhalb des festen Aggregatzustands sind magnetische Übergänge, z. B. vom paramagnetischen Zustand ohne Magnetisierung zum ferromagnetischen Zustand mit endlicher Magnetisierung. Abb. 2 zeigt das Phasendiagramm eines einfachen Ferromagneten mit äußerem Magnetfeld  $H$ , der unterhalb einer Curie-Temperatur  $T_c$  eine spontane Magnetisierung  $M$  auch noch im Fall  $H \rightarrow 0$  besitzt. Dabei kann  $M$  in verschiedene Raumrichtungen orientiert sein. Innerhalb des Magneten können auch Domänen mit verschieden orientierten Magnetisierungen existieren. Die Koexistenzkurve zwischen den gasförmigen und flüssigen Phasen in Abb. 1 ist analog zu der horizontalen Koexistenzkurve in Abb. 2 (bei Magnetfeld  $H=0$ ) zwischen den magnetischen Phasen mit verschiedener Orientierung von  $M$ .

Die Ursache für die makroskopische Magnetisierung  $M$  ist ein kooperativer Effekt, bei dem sich die magnetischen Momente benachbarter Atome aufgrund einer quantenmechanischen Austauschwechselwirkung bevorzugt parallel ausrichten. Dem wirken die unregelmäßigen Einflüsse thermischer Schwankungen entgegen, sodass oberhalb der Curie-Temperatur  $T_c$  die Magnetisierung verschwindet, wenn kein ordnendes Magnetfeld existiert. Da  $M$  ein Maß für die magnetische Ordnung darstellt, bezeichnet man diese Größe als Ordnungsparameter. Die analoge Größe bei einer Flüssigkeit ist die Differenz der Massendichte  $\rho$  im



flüssigen und gasförmigen Aggregatzustand,  $\rho_{fl} - \rho_{gas}$ , da die Dichtedifferenz ebenfalls für  $T \rightarrow T_c$  kontinuierlich verschwindet.

Aufgrund thermischer Schwankungen fluktuiert die lokale Magnetisierung eines Ferromagneten um ihren Mittelwert; dabei sind die Fluktuationen an verschiedenen Orten nicht unabhängig, sondern korreliert aufgrund der Austauschwechselwirkung, wenn die Orte nicht wesentlich weiter als eine gewisse Länge voneinander entfernt sind. Ähnliches gilt auch für Dichtefluktuationen in Flüssigkeiten. Diese Korrelationslänge  $\xi$  ist wichtig, um Phasenübergänge zu charakterisieren.

Zwischen den Korrelationen in Flüssigkeiten und Festkörpern gibt es jedoch einen wichtigen physikalischen Unterschied: die Anisotropie. Infolge der Kristallsymmetrie sind in Festkörpern gewisse Raumrichtungen ausgezeichnet. Dementsprechend hängen

Abb. 1 Dieses Phasendiagramm illustriert, bei welcher Temperatur und welchem Druck eine ein-komponentige Substanz von einer Phase in eine andere übergeht.

## KOMPAKT

- Kritische Exponenten und thermodynamische Skalenfunktionen unendlich großer Systeme sind unabhängig von mikroskopischen Details der Wechselwirkung.
- Kritische Phänomene in unterschiedlichsten Systemen lassen sich in Universalitätsklassen einteilen.
- Zu den größten Erfolgen der theoretischen Physik der letzten Jahrzehnte gehört es, diese Universalität sowie das sog. Skalenverhalten und die Zwei-Skalen-Universalität erklärt zu haben.
- Neuere Ergebnisse zeigen jedoch, dass sich isotrope und anisotrope Systeme innerhalb einer Universalitätsklasse unterscheiden und eine erhebliche Vielfalt an kritischen Phänomenen vorliegt.

Prof. Dr. Volker Dohm, Institut für Theoretische Physik B, Physikzentrum, RWTH Aachen, 52056 Aachen

die Korrelationen der Magnetisierungsfluktuationen in Festkörpern von der Richtung ab, im Gegensatz zu den Dichtefluktuationen in isotropen Flüssigkeiten. Aus diesem Grunde können in magnetischen Systemen mit nicht-kubischer Symmetrie drei verschiedene magnetische Korrelationslängen  $\xi^{(\alpha)}$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ , in Richtung gewisser Hauptachsen vorliegen.

Sowohl in Flüssigkeiten als auch in Festkörpern sind derartige Korrelationslängen typischerweise von mikroskopischer Größenordnung; dies gilt auch auf den Koexistenzlinien in Abb. 1 und 2. Eine Besonderheit tritt jedoch an kritischen Punkten auf.

### Dimensionen und Komponenten

Jede Substanz hat eine kritische Temperatur  $T_c$ , oberhalb derer sich flüssige und gasförmige Phasen nicht mehr unterscheiden lassen (Abb. 1). Beim Ferromagneten spielt die Curie-Temperatur die Rolle der kritischen Temperatur  $T_c$ . Jede Substanz hat ihr eigenes  $T_c$ , und alle mikroskopischen Details der Wechselwirkung beeinflussen den Wert von  $T_c$ , d. h. dieser Wert ist *nicht* universell. Insbesondere beeinflusst auch die Anisotropie von Festkörpern den Wert von  $T_c$ .

Eine *universelle*, d. h. allgemeingültige Gemeinsamkeit aller kritischen Punkte ist jedoch das unbegrenzte Anwachsen der Korrelationslängen für  $T \rightarrow T_c$  nach einem Potenzgesetz, also proportional zu  $|T - T_c|^{-\nu}$  mit einem „kritischen Exponenten“  $\nu$ . Hinreichend nahe bei  $T_c$  können Korrelationslängen makroskopische Größenordnungen annehmen, obwohl die atomaren Wechselwirkungen nur von mikroskopischer Reichweite sind. Dies macht kritische Phänomene in

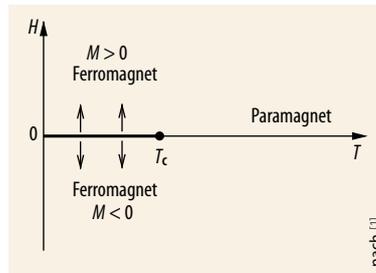


Abb. 2 Ein einfacher Ferromagnet geht je nach Magnetfeld und Temperatur in eine ferro- oder paramagnetische Phase.

gewissem Grade unempfindlich gegenüber mikroskopischen Details: Bei  $T_c$  tritt weitgehende Universalität thermodynamischer Eigenschaften auf [2, 3]. So hängt der Wert von  $\nu$  nicht von der Anisotropie ab.<sup>1)</sup>

Im Falle des Ferromagneten lässt sich das thermodynamische kritische Verhalten vollständig durch die freie Energie  $F(T, H)$  als Funktion der Temperatur  $T$  und des „ordnenden Feldes“  $H$  beschreiben.

Für  $H=0$  ist die (auf  $k_B T$  bezogene) freie Energie pro Volumen  $f=F/(k_B T V)$  im thermodynamischen Limes  $V \rightarrow \infty$  eine nichtanalytische Funktion der Temperatur  $T$  mit einem singulären Anteil  $f_s \sim |T - T_c|^{-\alpha}$ . Dies impliziert eine singuläre Temperaturabhängigkeit anderer thermodynamischer Größen, z. B. der spezifischen Wärme  $C \sim |T - T_c|^{-\alpha}$  mit einem kritischen Exponenten  $\alpha$  (Abb. 3) oder des Ordnungsparameters  $M \sim (T_c - T)^\beta$  mit einem kritischen Exponenten  $\beta$ . Die Universalität kritischer Phänomene spiegelt sich nun in der Tatsache wider, dass alle kritischen Exponenten  $\alpha, \beta, \nu, \dots$  unabhängig von mikroskopischen Details werden, also auch unabhängig von den Anisotropien eines Festkörpers.

Kritische Exponenten lassen sich mit großer Genauigkeit unter Schwerelosigkeit messen, weil dann die gravitationsbedingten Inhomogenitäten entfallen. So gelang es in einem Weltraumexperiment, das Potenzgesetz der spezifischen Wärme ( $\sim |T - T_\lambda|^{-\alpha}$ ) an der kritischen Temperatur  $T_\lambda$  des superfluiden Phasenübergangs von  $^4\text{He}$  mit extrem hoher Temperaturauflösung ( $T - T_\lambda \approx 10^{-9}$  K) zu bestätigen (Abb. 3).

Kritische Exponenten sind in gewissem Sinne Naturkonstanten, da sie nicht von mikroskopischen Details wie Gitterstruktur und der Art der internen Wechselwirkung des Materials abhängen (abgesehen von langreichweitigen Wechselwirkungen). Sie hängen lediglich von zwei allgemeinen Systemeigenschaften ab: von der Dimension  $d$  des Systems ( $d=3$  für gewöhnliche Systeme und  $d=2$  für Filme und Schichtsysteme) sowie der Zahl  $n$  der Komponenten des Ordnungsparameters. Daher lassen sich kritische Phänomene in „Universalitätsklassen“ einteilen, die alleine durch die Angabe von  $d$  und  $n$  charakterisiert sind (Tabelle). Die Universalitätsklasse mit  $(d, n=2)$  zeigt eine

1) Das gilt abgesehen von Spezialfällen mit sog. „starker“ Anisotropie, z. B. an Lifschitz-Punkten [4], wo  $\nu$  richtungsabhängig wird.

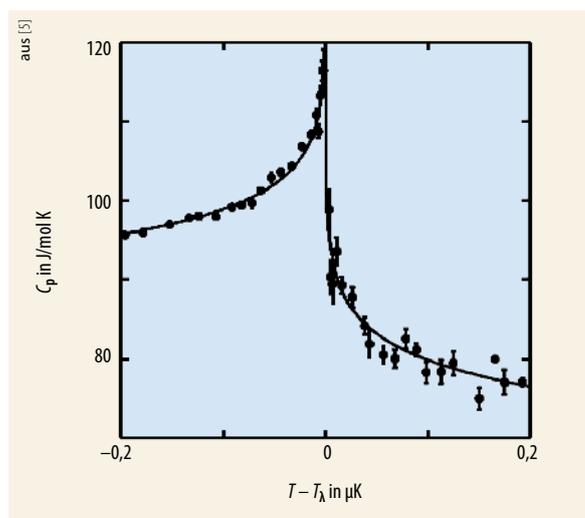


Abb. 3 Unter Schwerelosigkeit wurde die spezifische Wärme in der Nähe der kritischen Temperatur  $T_\lambda$  am superfluiden Phasenübergang von Helium-4 sehr genau gemessen (Symbole). Die durchgezogene Linie zeigt die Anpassung mit der Potenzfunktion  $|T - T_\lambda|^{-\alpha}$  und dem kritischen Exponenten  $\alpha = -0,0127$ .

Universalitätsklassen		
$n$	Ordnungsparameter	Systeme
1	Magnetisierung $M_z$ Dichtedifferenz $\rho_l - \rho_{\text{gas}}$	uniaxiale Magnete Flüssigkeiten
2	Magnetisierung $M = (M_x, M_y)$ komplexe Wellenfunktion $\psi = \psi_1 + i\psi_2$	planare Magnete superfluides $^4\text{He}$ Supraleiter
3	Magnetisierung $M = (M_x, M_y, M_z)$	magnetische Systeme

Tab. 1 Universalitätsklassen sind charakterisiert durch die Dimension  $d$  sowie die Zahl  $n$  der Komponenten des Ordnungsparameters. So gehören Magnete, deren Magnetisierung nur entlang einer Achse orientiert sein kann, sowie gewöhnliche Flüssigkeiten in eine Klasse mit  $n = 1$ .

erstaunliche Vielfalt: Sie enthält „planare“ Magnete mit einer zweikomponentigen Magnetisierung ebenso wie den  $\lambda$ -Übergang von normalflüssigem zu superfluidem  $^4\text{He}$  sowie den Übergang von Normalleitern zu Supraleitern, weil sich sowohl das Bose-Kondensat von superfluidem  $^4\text{He}$  als auch der supraleitende Zustand durch eine komplexe Wellenfunktion beschreiben lassen. Eine Universalitätsklasse enthält somit sowohl isotrope Systeme (Flüssigkeiten) als auch anisotrope Systeme (Festkörper).

### Skalen und Universalität

Zu den wichtigsten Erfolgen der Theoretischen Physik der letzten Jahrzehnte gehört es, diese Universalität sowie zwei weitere Konzepte, die innerhalb einer Universalitätsklasse eine wichtige Rolle spielen, erklärt zu haben [2].

Da ist zunächst das Skalenverhalten. Darunter versteht man, dass sich die freie Energie  $f_s$ , die eine Funktion von zwei unabhängigen Variablen  $T$  und  $H$  ist, auf die Form

$$f_s(t, H) = A_1 |t|^{2-\alpha} W(A_2 H / |t|^{\beta\delta}) \quad (1)$$

mit einer „Skalenfunktion“  $W(z)$  reduziert, die nur noch von einer (kombinierten) Variablen  $z = A_2 H / |t|^{\beta\delta}$  abhängt, wobei  $t = (T - T_c) / T_c$  ist. Als Folge davon haben alle thermodynamischen Größen analoge Skalenformen, z. B. die Magnetisierung

$$M(t, H) = -\partial f_s(t, H) / \partial H = B_1 |t|^\beta \Psi(A_2 H / |t|^{\beta\delta}), \quad (2)$$

mit  $B_1 = -A_1 A_2$  und  $\Psi(z) = W'(z)$ . Sowohl die kritischen Exponenten  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\delta$  als auch die Funktionen  $W(z)$  und  $\Psi(z)$  sind „universell“. Dies hat zur Folge, dass Kurvenscharen von  $M(t, H)$  zu verschiedenen  $t$  und von verschiedenen Systemen innerhalb derselben Universalitätsklasse auf eine einzige universelle Kurve  $\Psi(z)$  zusammenfallen, wenn man eine reskalierte Auftragung  $M(t, H) / (B_1 |t|^\beta)$  als Funktion von  $A_2 H / |t|^{\beta\delta}$  benutzt (Abb. 4). Auch räumliche Korrelationsfunktionen haben eine universelle Skalenstruktur. Aufgrund dieser Eigenschaft lässt sich die Zahl der kritischen Exponenten von zunächst sieben auf nur zwei unabhängige reduzieren [3].

Darüber hinaus bedeutet die Zwei-Skalen-Universalität, dass es bei Kenntnis der universellen Größen genügt, lediglich zwei nichtuniverselle Parameter  $A_1$  und  $A_2$  anzugeben, um das kritische Verhalten eines bestimmten Systems dieser Universalitätsklasse zu beschreiben – einschließlich aller Korrelationsfunktionen.

Diese Eigenschaften wurden zwar nur für unendlich große Systeme bewiesen, die Zwei-Skalen-Universalität darüber hinaus auch nur für isotrope Systeme, sie galten aber als so weitgehend gültig, dass sie auch auf endliche Systeme mit einer (hinreichend großen) charakteristischen Länge  $L$  erweitert wurden [2]. In endlichen Systemen sind alle Singularitäten abgerundet, wie Abb. 5 am Beispiel der spezifischen Wärme  $C(t, L)$

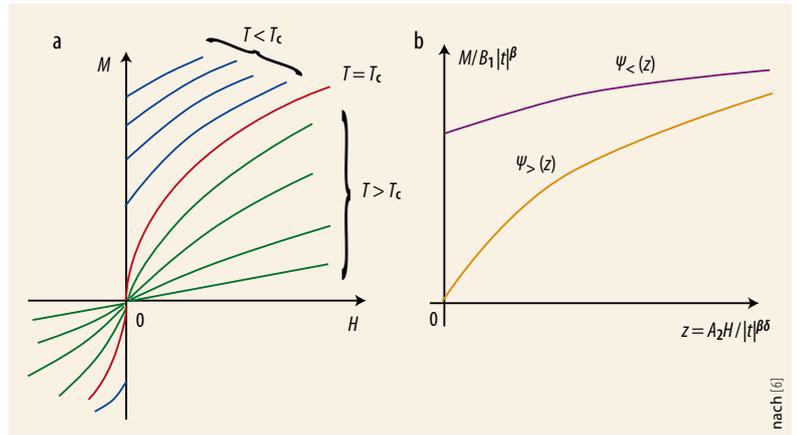


Abb. 4 Trägt man die Magnetisierung  $M(t, H)$  verschiedener Systeme derselben Universalitätsklasse als Funktion des Magnetfeldes  $H$  für verschiedene relative Temperaturen  $t = (T - T_c) / T_c$  auf, so ergibt sich eine „bunte“ Kurvenschar (a). Bei ei-

ner gemäß Gl. (2) skalierten Auftragung fallen diese Kurven hingegen auf eine einzige universelle Funktion  $\Psi$  mit zwei Zweigen  $\Psi_>$  und  $\Psi_<$  für  $T > T_c$  und  $T < T_c$ .

am superfluiden Phasenübergang von  $^4\text{He}$  zeigt. Diese Abrundungen hängen von der geometrischen Form der Begrenzung ab. Dennoch existiert bei gegebener Geometrie eine Skalenstruktur, die für die freie Energie  $f_s$  die Form

$$f_s(t, H, L) = L^{-d} F(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 H L^{\beta\delta/\nu}) \quad (3)$$

hat [2]. Dabei hängt  $F$  von den Randbedingungen ab. Argumente der Renormierungsgruppentheorie für isotrope Systeme [8] sowie exakte Modellrechnungen und Monte-Carlo-Simulationen stützen Gl. (3), die in der Literatur unter dem Begriff „finite-size scaling“ bekannt ist. Sie impliziert eine Reduktion der drei Va-

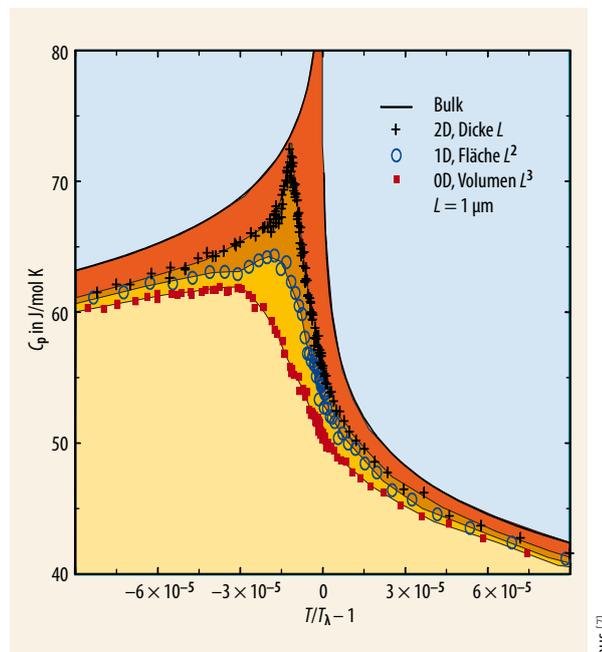


Abb. 5 Je stärker die Ausdehnung von Helium-4 eingeschränkt wird, desto „runder“ wird die Singularität der spezifischen Wärme in der Nähe des superfluiden Phasenübergangs. Die obere Kurve des unendlichen Systems entspricht Abb. 3, die Symbole darunter zeigen die Ergebnisse für einen Film der Dicke  $L$ , einen Zylinder mit Grundfläche  $L^2$  bzw. einen Würfel mit Volumen  $L^3$ ,  $L = 1 \mu\text{m}$ .

2) Dabei wurde ein anisotropes Kontinuumsmodell zugrunde gelegt, bei dem die diskreten Spinvariablen des Ising-Modells durch kontinuierliche einkomponentige Feldvariable ersetzt wurden. Der Ordnungsparameter ist in beiden Modellen einkomponentig, deswegen gehören beide Modelle zur selben Universalitätsklasse mit  $d=3, n=1$ .

riablen  $t, H, L$  auf nur zwei kombinierte Variable und hat große praktische Bedeutung bei der Analyse von Computersimulationen kleiner Modellsysteme gewonnen. Dabei wurde die Hypothese aufgestellt, dass die dimensionslose Skalenfunktion  $F(x, y)$  nicht von mikroskopischen Kopplungen abhängt, sondern dass sich alle nichtuniversellen Details in den beiden Konstanten  $C_1$  und  $C_2$  absorbieren lassen [2] – dies entspricht einer Erweiterung der Zwei-Skalen-Struktur aus Gl. (1) auf endliche Systeme.

Die postulierte Universalität von  $F(x, y)$  impliziert, dass am kritischen Punkt  $t=0, H=0$  die Amplitude  $F(0, 0)$  eine *universelle Zahl* ist, die charakteristisch für die betreffende Universalitätsklasse ist (bei gegebener Geometrie und Randbedingungen). Diese einfache Aussage hat sich kürzlich als unzutreffend erwiesen [9 – 11], wie Monte-Carlo-Simulationen am anisotropen Ising-Modell bestätigt haben [12].

### Anisotropie entscheidet

Als Modell für einen Ferromagneten sei das zweidimensionale Ising-Modell mit Kopplungen  $K > 0$  zwischen benachbarten Elementarmagneten („Spins“ mit zwei möglichen Orientierungen  $\sigma_i = \pm 1$ ) auf einem Quadratgitter in einem Magnetfeld  $H$  betrachtet (Abb. 6a). Je nach Wahl weiterer Kopplungen existieren zahlreiche Ising-Modelle mit einem ferromagnetischen kritischen Punkt. Dennoch besitzen alle diese Modelle dank der Universalität dieselben kritischen Exponenten und dieselben Skalenfunktionen  $W(z)$  und  $\Psi(z)$ .

Zur Illustration der Rolle der Anisotropie betrachten wir Diagonalkopplungen  $J$  zwischen übernächsten Nachbarn in (1,1)-Richtung. Diese Kopplungen zeichnen die Diagonalen aus, d. h. das System wird für  $J \neq 0$  anisotrop. Sowohl für  $J = 0$  als auch für  $J > 0$  hat das Modell einen ferromagnetischen kritischen Punkt derselben Universalitätsklasse mit  $d = 2, n = 1$ , d. h. die Skalenfunktionen  $W(z)$  und  $\Psi(z)$  sind unabhängig von  $J$ . Dies gilt sogar auch noch für  $J < 0$ , sofern  $J/K$  nicht zu stark negativ wird. Auch das Hinzufügen weiterer

Kopplungen (sofern sie nicht zu stark sind) würde die universellen Größen nicht ändern. Analoge Aussagen gelten für dreidimensionale Systeme (Abb. 6b).

Die grundlegende Frage, ob es gemäß Gl. (3) universelles kritisches Verhalten auch für *endliche* Systeme gibt, lässt sich an endlichen Ising-Modellen in zwei oder drei Dimensionen mit quadratischer oder kubischer Form der Länge  $L$  untersuchen. Insbesondere kann man sich dabei auf die behauptete Universalität der kritischen Amplitude  $F(0, 0)$  konzentrieren. Eine Berechnung von  $F(0, 0)$  mithilfe der Renormierungsgruppentheorie für  $d=3$  und periodische Randbedingungen hat nun kürzlich gezeigt, dass  $F(0, 0)$  explizit von dem Anisotropieparameter  $J/(K+2J)$  abhängt (Abb. 7) [11].<sup>2)</sup> Mit analogen Methoden lässt sich zeigen, dass die Universalität auch für nicht-kubische Geometrien mit realistischen Randbedingungen verletzt ist. So zeigte kürzlich eine exakte Modellrechnung, dass die zu  $F(0, 0)$  proportionale „Casimir-Amplitude“ [13], die in der Literatur über lange Zeit als universell galt, in Schichtsystemen mit verschiedenen Randbedingungen explizit von der Anisotropie abhängt [9, 14].

Diese Ergebnisse haben weitreichende Konsequenzen für alle kritischen Skalenfunktionen von beobachtbaren Größen in realen begrenzten anisotropen Systemen, z. B. der spezifischen Wärme, der Magnetisierung oder der kritischen Casimir-Kraft [13]. Beispiele für derartige Systeme sind anisotrope Supraleiter [15, 16], anisotrope magnetische Systeme sowie Festkörper mit strukturellen Phasenübergängen [17]. Auch sog. Quantenphasenübergänge [18] in Festkörpern nahe bei  $T=0$  (wo Quantenfluktuationen wichtiger als thermische Fluktuationen sind) werden von nichtuniversellen Anisotropien beeinflusst. Generell gilt, dass für die große Unterklasse von anisotropen Systemen (mit nichtkubischer Symmetrie) alle  $L$ -abhängigen Skalenfunktionen *nicht universell* sind.

Bislang ist es nicht gelungen, die in Abb. 7 gezeigte theoretische Vorhersage für die freie Energie in *drei* Dimensionen durch Experimente oder durch Modellsimulationen zu überprüfen. Ebenso aussagekräftig sind jedoch Monte-Carlo-Simulationen an zweidimensionalen Modellen, die wesentlich weniger Rechnerkapazität benötigen als dreidimensionale Modelle.

Das für zweidimensionale Ising-Modelle am genauesten untersuchte Maß für kritische Fluktuationen ist die von Binder eingeführte dimensionslose Kombination  $U = 1 - 1/3 \langle \sigma^4 \rangle / \langle \sigma^2 \rangle^2$  der zweiten und vierten Momente  $\langle \sigma^2 \rangle$  und  $\langle \sigma^4 \rangle$  der statistischen Verteilung der Magnetisierung  $\sigma = \sum_i \sigma_i$  [19]. Mithilfe von  $U$  lässt sich in Computersimulationen bequem ein kritischer Punkt lokalisieren. Am kritischen Punkt  $t=0, H=0$  hängt die „kritische Binder-Kumulante“  $U_c$  für hinreichend großes  $L$  direkt mit partiellen Ableitungen der Skalenfunktion  $F(x, y)$  der freien Energie zusammen. Somit muss sich die in Abb. 7 gezeigte Nichtuniversalität von  $F_c$  auch auf  $U_c$  auswirken.

Monte-Carlo-Simulationen von Selke und Shchur für das anisotrope zweidimensionale Ising-Modell er-

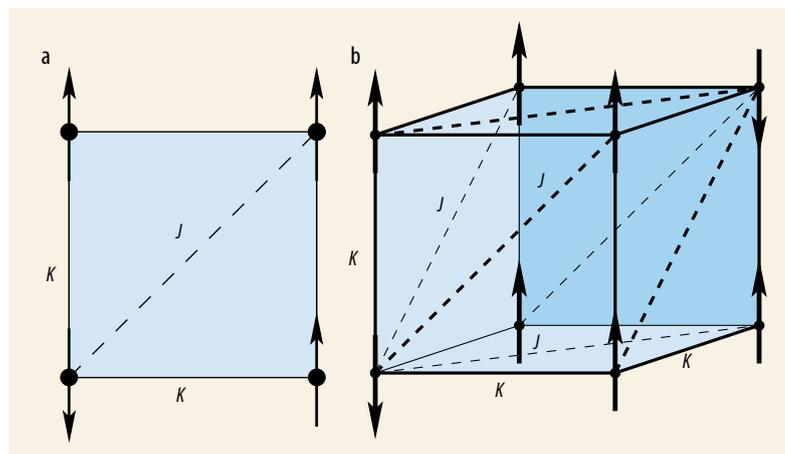


Abb. 6 Elementarzelle des zweidimensionalen Ising-Modells auf einem Quadratgitter mit anisotroper Kopplung

J (a) und die dreidimensionale Verallgemeinerung (b).

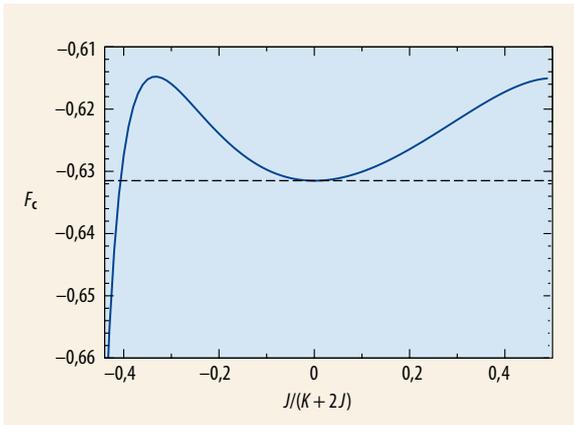


Abb. 7 Gemäß der Zwei-Skalen-Universalität der traditionellen Theorie sollte die Amplitude  $F_c = F(0, 0)$  nach Gl. (3) auch für ein Ising-Modell mit anisotroper Kopplung nicht von dem Anisotropieparameter  $J/(K+2J)$  abhängen (gestrichelt). Rechnungen mithilfe der Renormierungsgruppentheorie zeigen jedoch, dass dies nicht zutrifft (blau) [11].

gaben vor Kurzem tatsächlich eine nichtmonotone Abhängigkeit  $U_c(J/K)$  von dem Kopplungsverhältnis  $J/K$  im Bereich positiver Kopplung  $J$  [12], in quantitativer Übereinstimmung mit dem Ergebnis der Renormierungsgruppentheorie (Abb. 8). Neueste Simulationen auch im Bereich *negativer*  $J$  weisen ebenfalls nicht-universelles Verhalten in Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage auf [20]. Damit ist bestätigt, dass Skalenfunktionen anisotroper begrenzter Systeme nicht universell sind.

### Theoretische Beschreibung anisotroper Systeme

Obige am Beispiel des Ising-Modells illustrierten Ergebnisse lassen sich bereits im Rahmen eines einfachen Ginzburg-Landau-Modells plausibel machen (Infokasten). Der Effekt einer räumlichen Anisotropie auf kritisches Verhalten wird durch eine „Anisotropiematrix“  $A$  beschrieben; für das diskutierte zweidimensionale Ising-Modell ist die Matrix  $A$  nichtdiagonal,

$$A = c_0 \begin{pmatrix} K+J & J \\ J & K+J \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Eine Hauptachsentransformation auf Diagonalform zeichnet Eigenvektoren (Hauptachsen)  $e^{(1)}$  und  $e^{(2)}$  aus, in deren Richtungen die in der Einleitung erwähnten Korrelationslängen  $\xi^{(1)} = \xi_0^{(1)}|t|^{-\nu}$  und  $\xi^{(2)} = \xi_0^{(2)}|t|^{-\nu}$  verschiedene Amplituden  $\xi_0^{(\alpha)}$  besitzen.

Der entscheidende Punkt zum qualitativen Verständnis der Nichtuniversalität in endlichen Systemen ist der folgende: Die Orientierung der Hauptachsenrichtungen relativ zur Orientierung der Oberflächen des endlichen Systems beeinflusst die physikalischen Größen (anders als in unendlich großen Systemen, bei denen keine Berandungen existieren). Verschiedene Festkörper derselben Universalitätsklasse und mit derselben geometrischen Form, aber mit verschiedenen anisotropen Kopplungen besitzen deswegen verschiedene Hauptachsenrichtungen und verschiedenes kritisches Verhalten. Dies ist eine Quelle von nichtuni-

versellen Anisotropieeffekten, die auch am kritischen Punkt einen messbaren physikalischen Einfluss haben und in Flüssigkeiten nicht auftreten.

Diese qualitativen Überlegungen bedürfen natürlich einer quantitativen Absicherung auf der Basis einer statistischen Theorie mit Berücksichtigung der kritischen Fluktuationen. Eine solche Theorie liefert das sog.  $\varphi^4$ -Modell<sup>3)</sup>, das sich mithilfe der feldtheoretischen Renormierungsgruppentheorie systematisch untersuchen lässt [11]; dies führt dann auf die in Abb. 7 und 8 gezeigten Ergebnisse.

Die statistische Theorie auf der Basis des Ginzburg-Landau-Funktional (ii) lässt sich ganz allgemein auf reale anisotrope Systeme mit einem kritischen Punkt anwenden, wobei  $A_{\alpha\beta}$  phänomenologische Anisotropieparameter sind, die sich für das jeweilige System durch Streuexperimente (z. B. Licht- oder Neutronenstreuung) identifizieren lassen. In  $d$  Dimensionen enthält  $A$  bis zu  $d(d+1)/2$  unabhängige Parameter. Dies ist der Grund dafür, dass – statt der Zwei-Skalen-Universalität – in anisotropen Systemen eine „Multi-Parameter-Universalität“ mit bis zu  $d(d+1)/2 + 1$  nicht-universellen Parametern, d. h. sieben Parametern in drei Dimensionen, gilt. Die Amplituden  $\xi_0^{(\alpha)}$  der Korrelationslängen  $\xi^{(\alpha)}$  sind proportional zu den (positiven) Eigenwerten von  $A$ . Anisotropieeffekte werden besonders groß in der Nähe eines „Lifschitz-Punktes“ [4], an dem ein Eigenwert von  $A$  gegen Null geht.

Die Anisotropieparameter  $A_{\alpha\beta}$  beeinflussen nicht nur Skalenfunktionen physikalischer Größen *endlicher* Systeme (vgl. Abb. 7 und 8), sondern auch die Korrelationsfunktionen, Korrelationslängen sowie gewisse Amplitudenrelationen am kritischen Punkt *unendlich großer* anisotroper Systeme. Der direkte physikalische Einfluss der Anisotropie auf das kritische Verhalten in unendlich großen Systemen lässt sich an folgendem

3) Dieses Modell hat das statistische Gewicht  $\exp[-F_{\text{anisotrop}}/k_B T]$  mit  $F_{\text{anisotrop}}\{\varphi; A\}$  von Gl. ii im Infokasten, wobei allerdings jetzt  $\varphi(x)$  statistische Variable sind.

### DAS ANISOTROPE GINZBURG-LANDAU-MODELL

Traditionell beschreibt man das kritische Verhalten **isotroper Systeme** mithilfe des Energiefunktionals  $F_{\text{isotrop}}\{\varphi(x)\}$  der Landau-Theorie für die kontinuierliche Variable  $\varphi(x)$  im  $d$ -dimensionalen Volumen  $V$

$$F_{\text{isotrop}}\{\varphi\} = \int_V d^d x \left[ \frac{r_0}{2} \varphi^2 + \frac{1}{2} (\nabla \varphi(x))^2 + u_0 \varphi^4 \right], \quad (i)$$

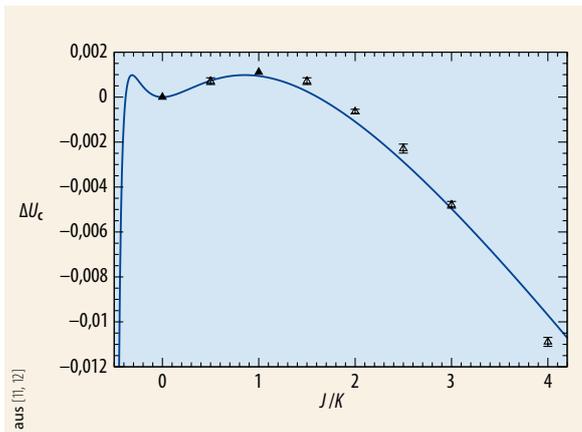
wobei  $r_0$  proportional zu  $T - T_c$  ist. Der Ordnungsparameter  $\varphi$  und die freie Energie  $F_{\text{isotrop}}\{\varphi\}$  ergeben sich (unter Vernachlässigung von Fluktuationen) aus der Minimierung von  $F_{\text{isotrop}}$  bezüglich  $\varphi$  bei gegebenen Randbedingungen. Der Effekt einer räumlichen Anisotropie lässt sich nun durch einen Term mit einer „Anisotropiematrix“  $A = (A_{\alpha\beta})$  beschreiben, der den isotropen Gradiententerm  $(\nabla \varphi(x))^2$  ersetzt:

$$F_{\text{anisotrop}}\{\varphi; A\} = \int_V d^d x \left[ \frac{r_0}{2} \varphi^2 + \sum_{\alpha,\beta=1}^d \frac{A_{\alpha\beta}}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial x_\beta} + u_0 \varphi^4 \right]. \quad (ii)$$

Dabei treten die anisotropen Kopplungen des mikroskopischen Gittersystems nur noch in der Form der Matrixelemente  $A_{\alpha\beta}$  auf, die durch die zweiten Momente der mikroskopischen Kopplungen  $J_{ij}$  zwischen den  $N$  Gitterpunkten  $x_i$  und  $x_j$

$$A_{\alpha\beta} = A_{\beta\alpha} = N^{-1} \sum_{i,j=1}^N (x_{i\alpha} - x_{j\alpha})(x_{i\beta} - x_{j\beta}) J_{ij}$$

gegeben sind. Hier bedeuten  $\alpha$  und  $\beta$  kartesische Indizes (1, 2, 3 für  $d=3$ ). Im einfachsten Fall einer kubischen Anisotropie ist die Matrix  $A$  einfach proportional zur Einheitsmatrix. Nicht-trivial ist erst eine nicht-kubische Anisotropie. Im Allgemeinen ist dann die Matrix  $A$  nichtdiagonal. Sie lässt sich aber durch Hauptachsentransformation diagonalisieren. Dadurch werden Eigenvektoren (Hauptachsen)  $e^{(\alpha)}$  ausgezeichnet, in deren Richtungen die Korrelationslängen  $\xi^{(\alpha)} = \xi_0^{(\alpha)}|t|^{-\nu}$  verschiedene Amplituden  $\xi_0^{(\alpha)}$  besitzen.



**Abb. 8** Für das zweidimensionale anisotrope Ising-Modell zeigen sowohl Monte-Carlo-Simulationen (Symbole) als auch die Renormierungsgruppentheorie (blaue Kurve), dass die Differenz  $\Delta U_c = U_c(J/K) - U_c(0)$  der kritischen Binder-Kumulative  $U_c$  nicht verschwindet.

einfachen Beispiel illustrieren. Aus der Theorie isotroper Systeme ist der Begriff des sog. Korrelationsvolumens bekannt: Dieses Volumen ist kugelförmig mit einem Radius der Korrelationslänge  $\xi$ , und das Produkt aus der freien Energie  $f_s(t, 0)$  und dem Korrelationsvolumen  $(4\pi/3) \xi^3$  ist universell [2]. In (dreidimensionalen) anisotropen Systemen jedoch gibt es nicht nur ein  $\xi$ , sondern drei Korrelationslängen  $\xi^{(\alpha)}$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ . Daher nimmt das Korrelationsvolumen die Form eines Ellipsoids mit einem Volumen  $(4\pi/3) \xi^{(1)} \xi^{(2)} \xi^{(3)}$  an, das direkt von den nichtuniversellen Anisotropieparametern  $A_{\alpha\beta}$  abhängt. Somit besitzen verschiedene anisotrope Systeme derselben Universalitätsklasse verschieden geformte Korrelationsvolumina. Man kann zeigen, dass dementsprechend in anisotropen Systemen das Produkt  $f_s(t, 0) \xi^{(1)} \xi^{(2)} \xi^{(3)}$  eine universelle Größe ist [9, 11]. Es gibt weitere Amplitudenrelationen am kritischen Punkt, die von der Korrelationslänge abhängen und in der traditionellen Theorie nur für isotrope Systeme formuliert wurden [2]: Solche Relationen unterscheiden sich für isotrope und anisotrope Systeme, obwohl es sich um Systeme derselben Universalitätsklasse handelt.

Der „Hamiltonian“ (ii) ist noch unvollständig insofern, als er nur Systeme mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen beschreibt. Reale Flüssigkeiten haben jedoch eine langreichweitige van-der-Waals-Wechselwirkung. Obwohl diese nicht die kritischen Exponenten verändert, verursacht sie zusätzliche nichtuniverselle Effekte in den Korrelationsfunktionen sowie in den thermodynamischen Größen begrenzter Systeme sogar im isotropen Fall [11].

### Zusammenfassung

Um das kritische Verhalten anisotroper Systeme zu beschreiben, ist es notwendig, innerhalb einer Universalitätsklasse *Unterklassen* von isotropen und anisotropen Systemen zu unterscheiden. Isotrope und anisotrope Unterklassen haben zwar dieselben kritischen Expo-

nenten und thermodynamischen Skalenfunktionen für unendlich große Systeme, aber eine verschiedene Anzahl von Korrelationslängen und nichtuniversellen Parametern, verschiedene Skalenfunktionen in begrenzter Geometrie, verschiedene räumliche Korrelationsfunktionen und verschiedene kritische Amplitudenrelationen. Somit liegt innerhalb einer Universalitätsklasse eine erhebliche Diversität kritischer Phänomene vor, die in der bisherigen Literatur weitgehend übersehen worden ist.

Als allgemeine Kernaussage bleibt festzuhalten: In Festkörpern mit nichtkubischer Symmetrie bleibt die Anisotropie auch am kritischen Punkt trotz der unendlichen Reichweite kritischer Korrelationen dominant und verursacht eine stärkere Nichtuniversalität kritischer Phänomene in Festkörpern als in Flüssigkeiten innerhalb derselben Universalitätsklasse.

### Literatur

- [1] V. Dohm, Phase Transitions, in: Encyclopedia of Physics, R. G. Lerner und G. L. Trigg (Hrsg.), Wiley-VCH, Weinheim (2005), S. 1901
- [2] V. Privman, A. Aharony und P. C. Hohenberg, in: Phase Transitions and Critical Phenomena, C. Domb und J. L. Lebowitz (Hrsg.), Academic, New York (1991), Bd. 14, S. 1
- [3] A. Pelissetto und E. Vicari, Phys. Rep. **368**, 549 (2002)
- [4] H. W. Diehl, Pramana-J. Phys. **64**, 803 (2005)
- [5] J. A. Lipa et al., Phys. Rev. **B 68**, 174518 (2003)
- [6] M. E. Fisher, in: Lecture Notes in Physics, F. J. W. Hahne (Hrsg.), Springer, Berlin (1983), Bd. 186, S. 1
- [7] M. O. Kimball et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 115301 (2004)
- [8] E. Brézin, J. Phys. (Paris) **43**, 15 (1982)
- [9] X. S. Chen und V. Dohm, Phys. Rev. **E 70**, 056136 (2004)
- [10] V. Dohm, J. Phys. **A 39**, L 259 (2006)
- [11] V. Dohm, Phys. Rev. **E 77**, 061128 (2008)
- [12] W. Selke und L. N. Shchur, J. Phys. **A 38**, L 739 (2005)
- [13] C. Hertlein et al., Nature Lett. **451**, 172 (2008)
- [14] B. Kastening und V. Dohm, arXiv:0907.1613v1 [cond-mat.stat-mech] (2009)
- [15] G. A. Williams, Phys. Rev. Lett. **92**, 197003 (2004)
- [16] K. H. Bennemann und J. B. Ketterson (Hrsg.), The Physics of Superconductors: Conventional and High- $T_c$  Superconductors, Springer, Berlin (2003)
- [17] A. D. Bruce und R. A. Cowley, Structural Phase Transitions, Taylor & Francis Ltd., London (1981)
- [18] S. Sachdev, Quantum Phase Transitions, Cambridge University Press, Cambridge (2002)
- [19] K. Binder, Z. Phys. **B 43**, 119 (1981)
- [20] W. Selke und L. N. Shchur, arXiv:0906.0721v1 [cond-mat.stat-mech] (2009), erscheint in Phys. Rev. **E**

### DER AUTOR

**Volker Dohm** (FV Dynamik, Statistische Physik) beschäftigt sich auch im Ruhestand noch mit der Theorie der Phasenübergänge, seinem Hauptforschungsgebiet. Dabei hat er auch die Nähe zu Experimenten gesucht und sich als Mitglied eines Planungsgremiums der NASA für Weltraumexperimente eingesetzt. Nach seinem Studium und der Promotion an der RWTH Aachen, Forschungsaufhalten und der Habilitation in Düsseldorf erhielt er zunächst einen Ruf an die Uni Göttingen, bevor er 1984 einem Ruf an die RWTH Aachen folgte. In seiner Freizeit spielt er Violine im Streichquartett.

