Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) SS 17

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier

Musterlösung: Blatt 11
Besprechung: 07.07.2017

---

1. 1D-Ising-Modell für $N = 3$: (4 + 6 + 8 = 18 Punkte)

Der Hamilton-Operator eines eindimensionalen Ising-Modells im Magnetfeld B lautet

$$\hat{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - \gamma B \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \tag{1}$$

wobei J die Austauschwechselwirkung ist und $\sigma_i = 2s_i^z = \pm 1$ (der erste Spin s_1 und der letzte Spin s_N sind nicht verbunden). In dieser Aufgabe betrachten wir drei Spins ($N = 3$).

(a) Wie sehen die Mikrozustände des Systems aus? Bestimmen Sie die zugehörigen Energien.

Lösung:

Es gibt $2^3 = 8$ Mikrozustände $\{\alpha\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$ mit $\sigma_i = \pm 1$:

$$\begin{aligned}
\uparrow\uparrow\uparrow: &\qquad E_{\uparrow\uparrow\uparrow} = -2J - 3\gamma B,\\
\downarrow\downarrow\downarrow: &\qquad E_{\downarrow\downarrow\downarrow} = -2J + 3\gamma B,\\
\downarrow\uparrow\uparrow: &\qquad E_{\downarrow\uparrow\uparrow} = -\gamma B,\\
\uparrow\uparrow\downarrow: &\qquad E_{\uparrow\uparrow\downarrow} = -\gamma B,\\
\downarrow\downarrow\uparrow: &\qquad E_{\downarrow\downarrow\uparrow} = \gamma B,\\
\uparrow\downarrow\downarrow: &\qquad E_{\uparrow\downarrow\downarrow} = \gamma B,\\
\uparrow\downarrow\uparrow: &\qquad E_{\uparrow\downarrow\uparrow} = 2J - \gamma B,\\
\downarrow\uparrow\downarrow: &\qquad E_{\downarrow\uparrow\downarrow} = 2J + \gamma B.
\end{aligned}$$

Man findet, dass Zustände mit gleicher Anzahl Bereichsgrenzen (benachbarte Spins haben unterschiedliche Orientierung) die gleiche Energie für $B = 0$ haben.

(b) Ausgehend vom allgemeinen Ausdruck

$$Z = \mathrm{Tr}\left\{ e^{-\hat{H}/(k_B T)} \right\}$$

für die Zustandssumme bestimmen Sie für $B = 0$ die freie Energie $F(T)$, die Entropie S und die Wärmekapazität c_B.

Lösung:

Wir berechnen die Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha} \\ &= 2e^{2\beta J}\cosh(3\beta\gamma B) + 4\cosh(\beta\gamma B) + 2e^{-2\beta J}\cosh(\beta\gamma B) && (2) \\ &\underbrace{\rightarrow}_{B=0} 4[1+\cosh(2\beta J)] = 2^3\cosh^2\frac{J}{k_BT}. && (3) \end{aligned}$$

Für die freie Energie F und die Entropie S bei $B=0$ erhalten wir damit

$$\begin{aligned} F &= -k_BT\ln Z = -3k_BT\ln 2 - 2k_BT\ln\left(\cosh\frac{J}{k_BT}\right), && (4) \\ S &= -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_B = 3k_B\ln 2 + 2k_B\ln\left(\cosh\frac{J}{k_BT}\right) - \frac{2J}{T}\tanh\frac{J}{k_BT}. && (5) \end{aligned}$$

Man kann den Limes $J\to 0$ betrachten, die Entropie ist dann einfach $S = 3k_B\ln 2$, was man bei 3 entarteten Spins 1/2 auch erwarten würde. Bleibt noch die Wärmekapazität c_B: zwei Terme heben sich auf, und wir bekommen

$$c_B = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_B = \frac{2J^2}{k_BT^2}\frac{1}{\cosh^2[J/(k_BT)]}. \tag{6}$$

(c) Berechnen Sie nun die Magnetisierung M und die magnetische Suszeptibilität χ im Limes $\gamma B \ll k_BT$.

Lösung:

Für die Magnetisierung erhalten wir:

$$\begin{aligned} M(B) = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_T &= \frac{k_BT}{Z}\frac{\partial Z}{\partial B} = \gamma\frac{3e^{2\beta J}\sinh(3\beta\gamma B) + \sinh(\beta\gamma B)(2+e^{-2\beta J})}{e^{2\beta J}\cosh(3\beta\gamma B) + \cosh(\beta\gamma B)(2+e^{-2\beta J})} \\ &\underbrace{\rightarrow}_{\gamma B\ll k_BT} \beta\gamma^2 B\frac{9e^{2\beta J} + (2+e^{-2\beta J})}{e^{2\beta J} + (2+e^{-2\beta J})} = \frac{\gamma^2 B}{k_BT}\left\{1 + \frac{2e^{2J/(k_BT)}}{\cosh^2[J/(k_BT)]}\right\}. && (7) \end{aligned}$$

Die magnetische Suszeptibilität ergibt sich zu

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \underbrace{\rightarrow}_{\gamma B\ll k_BT} \frac{\gamma^2}{k_BT}\left\{1 + \frac{2e^{2J/(k_BT)}}{\cosh^2[J/(k_BT)]}\right\} = \frac{\gamma^2}{k_BT}\left[1 + 2\left(1+\tanh\frac{J}{k_BT}\right)^2\right]. \tag{8}$$

Hohe Temperatur, $T \gg J/k_B \;\Rightarrow\; \chi \simeq 3\gamma^2/(k_BT)$;
Tiefe Temperatur, $T \ll |J|/k_B$, $J>0 \Rightarrow\; \chi \simeq 9\gamma^2/(k_BT)$;
$J<0 \Rightarrow\; \chi \simeq \gamma^2/(k_BT)$.

2. Korrelatoren im Ising-Modell: (12+10+10=32 Punkte)

Im Allgemeinen hat der Hamilton-Operator eines Ising-Modells die Form

$$\hat{H} = -J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j - \gamma B\sum_i \sigma_i, \tag{9}$$

wobei $\langle ij\rangle$ die Summation über nächste Nachbarn bezeichnet.

(a) Beweisen Sie allgemein, dass die magnetische Suszeptibilität im Ising-Modell die folgende Relation mit dem Spin-Korrelator erfüllt:

$$\chi = \frac{\gamma^2}{k_B T}\left[\sum_{i,j}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle - \Big\langle\sum_i \sigma_i\Big\rangle^2\right]. \tag{10}$$

Überprüfen Sie explizit, dass diese Beziehung im Limes $N \to \infty$ für die aus der Vorlesung bekannten χ und $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$ gilt.

Lösung:

Magnetisierung:

$$M = k_B T \frac{\partial}{\partial B}\ln Z = \frac{\gamma}{Z}\mathrm{Tr}\left[\sum_i \sigma_i e^{-\beta\hat{H}}\right] \tag{11}$$

Magnetische Suszeptibilität:

$$\begin{aligned}\chi &= \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\gamma}{Z}\frac{\partial}{\partial B}\left\{\mathrm{Tr}\left[\sum_i \sigma_i e^{-\beta\hat{H}}\right]\right\} - \frac{\gamma}{Z^2}\frac{\partial Z}{\partial B}\mathrm{Tr}\left[\sum_i \sigma_i e^{-\beta\hat{H}}\right]\\ &= \frac{\gamma^2}{k_B T}\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{Z}\sum_{ij}\sigma_i\sigma_j e^{-\beta\hat{H}}\right] - \frac{\gamma^2}{k_B T}\left[\frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left(\sum_i \sigma_i e^{-\beta\hat{H}}\right)\right]^2.\end{aligned} \tag{12}$$

Damit folgt:

$$\chi = \frac{\gamma^2}{k_B T}\left[\sum_{ij}\Big\langle\sigma_i\sigma_j\Big\rangle - \Big\langle\sum_i \sigma_i\Big\rangle^2\right]. \tag{13}$$

Aus der Vorlesung $(B=0)$ wissen wir:

$$\chi(T, B=0, N\gg 1) \simeq \frac{N\gamma^2}{k_B T}e^{2g}, \quad g = \frac{J}{k_B T}, \tag{14}$$

$$\Big\langle\sigma_i\sigma_j\Big\rangle = (\tanh g)^{|j-i|}. \tag{15}$$

Wir erhalten

$$\begin{aligned}&\left[\sum_i^N\sum_j^N\Big\langle\sigma_i\sigma_j\Big\rangle - \underbrace{\Big\langle\sum_i^N \sigma_i\Big\rangle^2}_{=0\ \text{für}\ B=0}\right] = \sum_{i=1}^N\left[\sum_{k=0}^{i-1}(\tanh g)^k + \sum_{k=1}^{N-i}(\tanh g)^k\right]\\ &= \frac{1}{1-\tanh g}\sum_{i=1}^N\left[1-(\tanh g)^i + \tanh g - (\tanh g)^{N-i}\right]\\ &= e^{2g}\left[N + \sinh(2g)\left(\tanh^N g - 1\right)\right] \simeq Ne^{2g}.\end{aligned} \tag{16}$$

(b) Analog zur Berechnung von $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$ in der Vorlesung finden Sie für $B=0$ die Korrelatoren $\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_k\rangle$ und $\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l\rangle$ im eindimensionalen Ising-Modell (1) im thermodynamischen Limes $N\to\infty$.

Lösung:

Wir wählen die periodischen Randbedingungen, wie in der Vorlesung. Wir benutzen die Transfermatrizen:

$$T_{\sigma\sigma'} = \exp\left\{\beta J\sigma\sigma' + \frac{\beta\gamma B}{2}(\sigma+\sigma')\right\}, \tag{17}$$

wobei

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{g+h} & e^{-g} \\ e^{-g} & e^{g-h} \end{pmatrix} \tag{18}$$

mit $g = \beta J$ und $h = \beta\gamma B$. Der Fall $B = 0$ bzw. $h = 0$:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{g} & e^{-g} \\ e^{-g} & e^{g} \end{pmatrix} \tag{19}$$

Eigenwerte und Eigenvektoren:

$$\lambda_1 = e^g + e^{-g}, \quad l_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{20}$$

$$\lambda_2 = e^g - e^{-g}, \quad l_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{21}$$

Den 3er- und den 4er-Korrelator berechnen wir analog zu $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$ aus der Vorlesung. Wir nehmen an, dass $i \le j \le k \le l$. Für den 3er-Korrelator finden wir:

$$\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_k\rangle = (\langle 1|\sigma_z|1\rangle)^3 = 0. \tag{22}$$

Wir wenden den thermodynamischen Limes auf den 4er-Korrelator $\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l\rangle$ an und berücksichtigen $\langle 1|\sigma_z|1\rangle = 0$:

$$\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l\rangle = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{i-j}\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k-l}(\langle 1|\sigma_z|2\rangle)^4. \tag{23}$$

Dieser Ausdruck hängt nur von den Abständen $i-j$ und $k-l$, aber nicht von $j-k$. Der Vergleich mit dem 2er-Korrelator aus der Vorlesung liefert deshalb den einfachen Zusammenhang

$$\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l\rangle = \langle\sigma_i\sigma_j\rangle\langle\sigma_k\sigma_l\rangle. \tag{24}$$

Diese Relation gilt auch für $h > 0$. Für $h = 0$ ist $\langle 1|\sigma_z|2\rangle = 1$ und damit

$$\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l\rangle = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{i-j}\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k-l} = \left(\tanh\frac{J}{k_BT}\right)^{i-j+k-l}, \quad i \le j \le k \le l. \tag{25}$$

(c) Mit Hilfe der Transfermatrixmethode bestimmen Sie für $N \to \infty$ die Korrelationsfunktion $\langle\sigma_i\sigma_{i+n}\rangle - \langle\sigma_i\rangle^2$ für das eindimensionale Ising-Modell (1) im endlichen Magnetfeld $B > 0$.

Lösung:

Die Eigenwerte λ_1 und λ_2 der Transfermatrix für $B > 0$:

$$\det\left(\hat{T} - \lambda\hat{1}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_{1,2} = e^g\cosh h \pm \sqrt{e^{2g}\sinh^2 h + e^{-2g}}. \tag{26}$$

Eigenvektoren:

$$l_1 = \frac{1}{\sqrt{1+e^{2g}(\lambda_1 - e^{g-h})^2}} \begin{pmatrix} e^g(\lambda_1 - e^{g-h}) \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{27}$$

$$l_2 = \frac{1}{\sqrt{1+e^{2g}(\lambda_2 - e^{g-h})^2}} \begin{pmatrix} e^g(\lambda_2 - e^{g-h}) \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{28}$$

Korrelationsfunktion (Vorlesung):

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = \sum_{l=1,2} \sum_{l'=1,2} |\langle l|\hat{\sigma}_z|l'\rangle|^2 \frac{\lambda_l^{N-n}\lambda_{l'}^n}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \stackrel{N\to\infty}{\to} \sum_{l,l'} |\langle 1|\hat{\sigma}_z|l'\rangle|^2 \left(\frac{\lambda_{l'}}{\lambda_1}\right)^n. \tag{29}$$

Mit

$$\langle 1|\hat{\sigma}_z|1\rangle = \frac{\sinh^2 h}{\sinh^2 h + e^{-4g}}, \quad \langle 1|\hat{\sigma}_z|2\rangle = \frac{e^{-4g}}{\sinh^2 h + e^{-4g}} \tag{30}$$

erhalten wir

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = \frac{1}{\sinh^2 h + e^{-4g}} \left[\sinh^2 h + \frac{\lambda_2^n}{\lambda_1^n} e^{-4g}\right]. \tag{31}$$

Für $n \to \infty$ haben wir $\lambda_2^n/\lambda_1^n \to 0$. Deswegen

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle\Big|_{n\to\infty} \to \langle \sigma_i \rangle^2 = \frac{\sinh^2(\beta\gamma B)}{\sinh^2(\beta\gamma B) + e^{-4\beta J}}. \tag{32}$$

Letztendlich

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2 &= \frac{e^{-4\beta J}}{\sinh^2(\beta\gamma B) + e^{-4\beta J}} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^n \\ &= \frac{e^{-4\beta J}}{\sinh^2(\beta\gamma B) + e^{-4\beta J}} \left(\frac{\cosh\beta\gamma B - \sqrt{\sinh^2(\beta\gamma B) + e^{-4\beta J}}}{\cosh\beta\gamma B + \sqrt{\sinh^2(\beta\gamma B) + e^{-4\beta J}}}\right)^n. \end{aligned} \tag{33}$$

Die Korrelationslänge $\xi(B)$ ist durch

$$\xi^{-1} = \ln \frac{\cosh\beta\gamma B - \sqrt{\sinh^2(\beta\gamma B) + e^{-4\beta J}}}{\cosh\beta\gamma B + \sqrt{\sinh^2(\beta\gamma B) + e^{-4\beta J}}} \tag{34}$$

gegeben.

3. Unendlich reichweitige Wechselwirkung: (6 + 14 = 20 Punkte)

Betrachten Sie ein Ising-Modell mit unendlicher Reichweite der Wechselwirkung. Jeder Spin $s_i = 1/2$ wechselwirkt mit jedem anderem Spin (und nicht nur mit seinen nächsten Nachbarn):

$$\hat{H} = -\frac{J}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \sigma_i \sigma_j - \gamma B \sum_{i=1}^{N} \sigma_i\,. \tag{35}$$

Wichtig ist hierbei, dass die Kopplung J/N mit N^{-1} abnimmt, da die Gesamtenergie extensiv sein muss.

(a) Finden Sie, wie viele Möglichkeiten gibt es, um einen gegebenen Gesamtspin S_{tot} zu bekommen. Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme Z für dieses Modell im Limes $N \gg 1$.

Lösung:

Der Hamilton-Operator hängt nur vom Gesamtspin ab und nicht von der mikroskopischen Konfiguration der Einzelspins:

$$\hat{H} = -\frac{J}{N}\left(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right)^2 - \gamma B\sum_{i=1}^{N}\sigma_i = -\frac{4J}{N}S_{\text{tot}}^2 - 2\gamma B S_{\text{tot}}\,, \tag{36}$$

wobei in der letzten Umformung der Gesamtspin

$$S_{\text{tot}} = \sum_i s_i = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{37}$$

eingeführt wurde. Da die Gesamtenergie nur vom Gesamtspin abhängt, kann man die Zustandssume kombinatorisch ansetzen. Anstatt über alle Spinkonfigurationen zu summieren

$$Z = \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \exp\Big[-\beta\hat{H}\left(S_{\text{tot}}\right)\Big] \tag{38}$$

können wir über den Gesamtspin S_{tot} summieren

$$Z = \sum_{S_{\text{tot}}} \rho(S_{\text{tot}})\, \exp\Big[-\beta\hat{H}(S_{\text{tot}})\Big], \tag{39}$$

wobei $\rho(S_{\text{tot}})$ eine Art Zustandsdichte ist und angibt wieviele verschiedenen Möglichkeiten es gibt den Gesamtspin S_{tot} zu realisieren. Zuerst, stellen wir uns vor, dass alle N Spins nach unten zeigen. Damit ist $S_{\text{tot}} = -N/2$. Diese Möglichkeit gibt es genau einmal. Als nächstes überlegen wir uns, was passiert, wenn wir k Spins nach oben umklappen. Für jeden umgeklappten Spin ändert sich der Gesamtspin um 1. Damit ist $S_{\text{tot}} = -N/2+k$. Der Faktor $\rho(S_{\text{tot}})$ gibt dann an, wieviele Möglichkeiten es gibt, sich aus N Spins genau k Spins zum Umklappen herauszusuchen. Das ist die Definition des Binomialfaktors

$$\binom{N}{k} = \frac{N!}{k!(N-k)!}. \tag{40}$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{k=0}^{N}\binom{N}{k}\exp\Big[-\beta H(S_{\text{tot}} = -N/2+k)\Big] \\ &= \sum_{k=0}^{N}\binom{N}{k}\exp\Big[\beta\frac{J}{N}(-N+2k)^2 + \beta\gamma B(-N+2k)\Big]. \end{aligned} \tag{41}$$

Für $N \gg 1$ können wir die Stirling-Formel verwenden (wie bereits in Blatt 1 Aufgabe 1 für $k = x\cdot N$) und die Summe als Integral schreiben

$$\begin{aligned} Z =& \frac{1}{\sqrt{2\pi N}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{1}{\sqrt{x(1-x)}} \\ &\times\exp\underbrace{\left\{N\left[-x\ln(x)-(1-x)\ln(1-x)+\beta J(-1+2x)^2+\beta\gamma B(-1+2x)\right]\right\}}_{-Ng(x)}. \end{aligned} \tag{42}$$

Die Zustandsumme kann daher in folgende Form gebracht werden:

$$Z \propto e^{-N\, g(x_0)}, \quad g'(x)\big|_{x=x_0} = 0, \tag{43}$$

wobei es sich bei x_0 um das Maximum der Funktion $\exp[-N\, g(x)]$ handelt.

(b) Verwenden Sie die Hubbard-Stratonovich-Transformation

$$e^{\alpha X^2} = \sqrt{\frac{1}{4\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda\ \exp\left(-\frac{\lambda^2}{4\alpha} + \lambda X\right)$$

um die Zustandssumme als Integral über die Hilfsvariable λ zu schreiben. Berechnen Sie dann die Integrale über λ in der Zustandssumme mit Hilfe der Sattelpunktmethode. Vergleichen Sie die Sattelpunktgleichung mit der Selbstkonsistenzgleichung der Molekularfeldtheorie.

Lösung:

Die Idee der Hubbard-Stratonovich-Transformation ist, eine quadratische Wechselwirkung zwischen zwei Spins/Teilchen/o.ä. durch die Wechselwirkung mit einem Hilfsfeld (hier: λ) auszudrücken. In dieser Teilaufgabe summieren wir über alle Spinkonfigurationen, um die Zustandssumme Z zu berechnen:

$$Z = \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} e^{-\beta\hat{H}} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp\left(\frac{4\beta J}{N} S_{\text{tot}}^2 + 2\beta\gamma B S_{\text{tot}}\right).$$

Einsetzen der Hubbard-Stratonovich-Transformation mit $\alpha = \beta J/N$ und $X = 2S_{\text{tot}}$

$$\exp\left(\frac{4\beta J}{N} S_{\text{tot}}^2\right) = \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda\ \exp\left(-N\frac{\lambda^2}{4\beta J} + 2\lambda S_{\text{tot}}\right)$$

ergibt:

$$Z = \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\lambda\ \exp\left(-N\frac{\lambda^2}{4\beta J} + 2\lambda S_{\text{tot}} + 2\beta\gamma B S_{\text{tot}}\right). \tag{44}$$

Damit haben wir erreicht, dass der Term S_{tot} nur noch linear im Exponenten steht. Ziehen wir nun die Summe unter das Integral und berechnen nur die von S_{tot} abhängigen Terme ist die Berechnung analog zur Zustandssumme für nicht wechselwirkende Spins und führt zur üblichen Faktorisierung:

$$\begin{aligned}
\sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} e^{2(\lambda+\beta\gamma B)S_{\text{tot}}} &= \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} e^{(\lambda+\beta\gamma B)\sum_{i=1}^N \sigma_i} = \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \prod_{i=1}^N e^{(\lambda+\beta\gamma B)\sigma_i} \\
&= \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{(\lambda+\beta\gamma B)\sigma_i} = \prod_{i=1}^N \left(e^{+(\lambda+\beta\gamma B)} + e^{-(\lambda+\beta\gamma B)}\right) \\
&= \Big[2\cosh(\lambda+\beta\gamma B)\Big]^N
\end{aligned} \tag{45}$$

Dies wird in Gl. (44) eingesetzt:

$$Z \overset{(44)(45)}{=} \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda\ \exp\left(-N\frac{\lambda^2}{4\beta J}\right) \Big(2\cosh(\lambda+\beta\gamma B)\Big)^N = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\lambda\ e^{-Nf(\lambda)}. \tag{46}$$

In der neu definierten Funktion $f(\lambda)$

$$f(\lambda) = \frac{\lambda^2}{4\beta J} - \ln\left[\cosh(\lambda + \beta\gamma B)\right] - \ln 2 - \underbrace{\frac{1}{2N}\ln\frac{N}{4\pi\beta J}}_{\to 0 \text{ für } N \to \infty} \tag{47}$$

kann der letzte Term im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ vernachlässigt werden. Das Integral in Gl. (46) wird für $N \to \infty$ nur vom Maximum des Integranden bestimmt. Wir bezeichnen mit λ_0 das Minimum von $f(\lambda)$ und damit das Maximum von $\exp[-Nf(\lambda)]$. Dann gilt:

$$Z \propto e^{-Nf(\lambda_0)} \qquad \text{für } N \to \infty. \tag{48}$$

Da λ_0 das Minimum von f bezeichnet, folgt durch Nullsetzen der Ableitung

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda} \overset{(47)}{=} \frac{\lambda}{2\beta J} - \tanh(\lambda + \beta\gamma B) = 0 \tag{49}$$

die folgende Bedingung für λ_0 (Sattelpunktgleichung):

$$\lambda_0 = 2\beta J \tanh(\lambda_0 + \beta\gamma B). \tag{50}$$

Der Vergleich mit der Selbstkonsistenzgleichung aus der Molekularfeldtheorie (mit der Zahl der nächsten Nachbarn z, s. Vorlesung)

$$\langle\sigma\rangle = \tanh\left(\beta\gamma B + \beta J z\langle\sigma\rangle\right) \tag{51}$$

liefert

$$\lambda_0 \leftrightarrow 2\beta J\langle\sigma\rangle, \quad z \leftrightarrow 2. \tag{52}$$

Bemerkung zu Aufgabe 1(c).

Für beliebiges N kann man die Zustandssumme mit Hilfe der Transfermatrixmethode bestimmen (s. Vorlesung). Es ist jedoch lehrreich, Z auch direkt zu berechnen. Damit wird auch eine Verbindung zu Aufgabe 2 hergestellt. Beachten Sie, dass in der Vorlesung die periodischen Randbedingungen (mit der Wechselwirkung zwischen σ_1 und σ_N) betrachtet wurden.

Wir leiten zunächst eine hilfreiche Relation her. Sei $a \in \mathbb{C}$, dann gilt

$$e^{a\sigma} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a\sigma)^n}{n!} = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(a\sigma)^{2m}}{(2m)!} + \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(a\sigma)^{2m+1}}{(2m+1)!} \overset{\sigma^{2m}=1}{=} \sum_{m=0}^{\infty}\frac{a^{2m}}{(2m)!} + \sigma\sum_{m=0}^{\infty}\frac{a^{2m+1}}{(2m+1)!}$$
$$= \cosh a + \sigma\sinh a.$$

Die Zustandssumme für N Spins bei $B = 0$ lautet

$$Z(N) = \sum_{\{\sigma_i\}}\exp\left(\frac{J}{k_BT}\sum_{i=1}^{N-1}\sigma_i\sigma_{i+1}\right) = \sum_{\{\sigma_i\}}\prod_{i=1}^{N-1}\exp\left(\frac{J}{k_BT}\sigma_i\sigma_{i+1}\right) \tag{53}$$

mit

$$\exp\left(\frac{J}{k_BT}\sigma_i\sigma_{i+1}\right) = \cosh\frac{J}{k_BT} + \sigma_i\sigma_{i+1}\sinh\frac{J}{k_BT}. \tag{54}$$

Speziell für $N=3$:

$$\begin{aligned}
Z(3) &= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^{2} \left(\cosh \frac{J}{k_B T} + \sigma_i \sigma_{i+1} \sinh \frac{J}{k_B T} \right) \\
&= \sum_{\{\sigma_i\}} \left(\cosh^2 \frac{J}{k_B T} + (\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3) \cosh \frac{J}{k_B T} \sinh \frac{J}{k_B T} + \sigma_1\sigma_2\sigma_2\sigma_3 \sinh^2 \frac{J}{k_B T} \right) \\
&= 2^3 \cosh^2 \frac{J}{k_B T}, \qquad (55)
\end{aligned}$$

weil

$$\sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_1\sigma_2 = \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_2\sigma_3 = 0, \qquad \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_1\sigma_2\sigma_2\sigma_3 = \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_1\sigma_3 = 0. \qquad (56)$$

Allgemein gilt für N Spins

$$\sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_j \sigma_k = 2^N \delta_{jk} \qquad (57)$$

und man erhält mit der selben Argumentation wie für 3 Spins:

$$Z(N) = 2^N \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{N-1}. \qquad (58)$$

Die Magnetisierung für beliebiges N lautet:

$$M = \frac{k_B T}{Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = \frac{\gamma}{Z} \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{j=1}^{N} \sigma_j \exp\left(\frac{J}{k_B T} \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\gamma B}{k_B T} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right),$$

wobei

$$Z(B,N) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left(\frac{J}{k_B T} \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{\gamma B}{k_B T} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \right). \qquad (59)$$

Wenn $\gamma B \ll k_B T$,

$$\exp\left(\frac{\gamma B}{k_B T} \sigma_i \right) \approx 1 + \frac{\gamma B}{k_B T} \sigma_i, \qquad (60)$$

und $Z(B,N) \simeq Z(B=0,N)$.
Dann erhalten wir

$$M \simeq \gamma \sum_{j=1}^{N} \underbrace{\langle \sigma_j \rangle|_{B=0}}_{=0} + \frac{\gamma^2 B}{k_B T} \left(\sum_{j=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle|_{B=0} \right).$$

Berechnen wir zunächst $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ für $B=0$:

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \sigma_j \exp\left(\frac{J}{k_B T} \sum_{k=1}^{N-1} \sigma_k \sigma_{k+1} \right) \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \sigma_j \prod_{k=1}^{N-1} \left[\cosh \frac{J}{k_B T} + \sigma_k \sigma_{k+1} \sinh \frac{J}{k_B T} \right] \\
&= \frac{2^N}{Z} \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{N-1-|i-j|} \left(\sinh \frac{J}{k_B T} \right)^{|i-j|} \overset{(58)}{=} \left(\tanh \frac{J}{k_B T} \right)^{|i-j|}. \qquad (61)
\end{aligned}$$

Dabei haben wir verwendet, dass im Produkt nur der Term übrig bleibt, in welchem $\sigma_i\sigma_j$ mit sich selbst multipliziert wird. Für $N = 3$ erhalten wir mit dieser Formel:

$$\langle (\sigma_i)^2 \rangle = 1, \quad \langle \sigma_1\sigma_2 \rangle = \langle \sigma_2\sigma_3 \rangle = \tanh \frac{J}{k_B T}, \quad \langle \sigma_1\sigma_3 \rangle = \tanh^2 \frac{J}{k_B T}. \tag{62}$$

Somit gilt

$$\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\langle \sigma_i\sigma_j \rangle = 3 + 2\left(\langle \sigma_1\sigma_2 \rangle + \langle \sigma_2\sigma_3 \rangle + \langle \sigma_1\sigma_3 \rangle\right) = 3 + 2\left(2\tanh\frac{J}{k_B T} + \tanh^2\frac{J}{k_B T}\right). \tag{63}$$

Für die Magnetisierung erhalten wir:

$$M = \frac{\gamma^2 B}{k_B T}\left[1 + 2\left(1 + \tanh\frac{J}{k_B T}\right)^2\right]. \tag{64}$$

Bemerkung zu Aufgabe 2(c).

Man kann die Korrelationsfunktion ohne Verwendung der expliziten Form der Eigenvektoren (27) und (28) berechnen. Wir führen die gedrehte Transfermatrix

$$t_{\sigma_i\sigma_{i+1}} = \sigma_i T_{\sigma_i\sigma_{i+1}}\sigma_{i+1} \tag{65}$$

für das Segment zwischen zwei Spinoperatoren σ_i und σ_j ein:

$$\langle \sigma_i\sigma_{i+n} \rangle = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left\{\overbrace{\hat{T}\ldots\hat{T}}^{i-1}\,\overbrace{\hat{t}\ldots\hat{t}}^{n}\,\overbrace{\hat{T}\ldots\hat{T}}^{N-i-n+1}\right\} = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left\{\hat{t}^n\hat{T}^{N-n}\right\}. \tag{66}$$

Schreiben wir jetzt explizit:

$$\hat{T} = a + \vec{b}_+\cdot\vec{\sigma}, \quad \hat{t} = a + \vec{b}_-\cdot\vec{\sigma}, \quad a = e^g\cosh h, \quad \vec{b}_\pm = \left(\pm e^{-g}, 0, e^g\sinh h\right)^T \tag{67}$$

wobei $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T$ und

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{68}$$

die Pauli-Matrizen sind. Die folgende Relationen sind hilfbar ($b = |\vec{b}\,|$):

$$F\left(a + \vec{b}\cdot\vec{\sigma}\right) = \frac{1}{2}\left[F(a+b) + F(a-b)\right] + \frac{1}{2b}\left[F(a+b) - F(a-b)\right](\vec{b}\cdot\vec{\sigma}), \tag{69}$$

$$\mathrm{Tr}\left[(\vec{u}\cdot\vec{\sigma})(\vec{v}\cdot\vec{\sigma})\right] = 2\,(\vec{u}\cdot\vec{v}). \tag{70}$$

Wir finden dann mit $|\vec{b}_+| = |\vec{b}_-| = b$, $\lambda_1 = a + b$ und $\lambda_2 = a - b$:

$$\hat{T}^{N-n} = \frac{1}{2}\left(\lambda_1^{N-n} + \lambda_2^{N-n}\right) + \frac{1}{2b}\left(\lambda_1^{N-n} - \lambda_2^{N-n}\right)\vec{b}_+\cdot\vec{\sigma}, \tag{71}$$

$$\hat{t}^n = \frac{1}{2}\left(\lambda_1^n + \lambda_2^n\right) + \frac{1}{2b}\left(\lambda_1^n - \lambda_2^n\right)\vec{b}_-\cdot\vec{\sigma}. \tag{72}$$

Weil $|\lambda_2/\lambda_1| = |(a-b)/(a+b)| < 1$, vernachlassigen wir die Glieder $(\lambda_2/\lambda_1)^N$ und kommen schließlich zur Gl. (31):

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\lambda_2^n}{\lambda_1^n} + \left(1 - \frac{\lambda_2^n}{\lambda_1^n} \right) \frac{\left(\vec{b}_+ \cdot \vec{b}_- \right)}{b^2} \right] = \frac{\sinh^2 h + (\lambda_2^n/\lambda_1^n) e^{-4g}}{\sinh^2 h + e^{-4g}}. \tag{73}$$

Bemerkung zu Aufgabe 3(a).

Das Minimum der Funktion $g(x)$ wird durch folgende Gleichung bestimmt:

$$\ln \left(\frac{1-x}{x} \right) + 8\beta J \cdot x - 4\beta + 2\beta\gamma B = 0 \tag{74}$$

Mit

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\langle S_{\text{tot}} \rangle}{N} = \frac{2}{N} \left\langle -\frac{N}{2} + k \right\rangle = -1 + 2x_0 \tag{75}$$

können wir Gl. (74) in Abhängigkeit von $\langle \sigma \rangle$ schreiben. Dies führt zu

$$\ln \left(\frac{1 - \langle \sigma \rangle}{1 + \langle \sigma \rangle} \right) + 4\beta J \langle \sigma \rangle + 2\beta\gamma B = 0 \tag{76}$$

Dies kann analog zu Blatt 10 geschrieben werden als

$$-2 \operatorname{Artanh} \langle \sigma \rangle + 4\beta J \langle \sigma \rangle + 2\beta\gamma B = 0 \tag{77}$$

und somit

$$\langle \sigma \rangle = \tanh \left(2\beta J \langle \sigma \rangle + \beta\gamma B \right). \tag{78}$$

Mit $\lambda_0 = 2\beta J \langle \sigma \rangle$ entspricht dies gerade Gl. (50).

EULENFEST

der Fachschaft Physik

13.7.2017

Open Air am Physik-Flachbau

16:00 Prof-Cafe
19:00 Poetry-Slam
21:00 DJ

Eintritt frei!