

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

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina KlierMusterlösung: Blatt 12
Besprechung: 14.07.2017

1. 2D-Ising-Modell: (5+9+6=20 Punkte)

Betrachten Sie ein 2D-Ising-Modell aus N Spins ohne äußeres Magnetfeld auf einem Quadratgitter (Koordinationszahl $z = 4$) mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (1)$$

(a) Bringen Sie die Zustandssumme auf die Form

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{P(N)} \sum_{\sigma} \prod_{\langle ij \rangle} \left(1 + \sigma_i \sigma_j \tanh \frac{J}{k_B T} \right). \quad (2)$$

Bestimmen Sie die Zahl $P(N)$ für $N \gg 1$.

Lösung:

Die Mikrozustände sind $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$. Wir betrachten die Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} [\cosh(\beta J \sigma_i \sigma_j) + \sinh(\beta J \sigma_i \sigma_j)]. \end{aligned} \quad (3)$$

Durch die Reihenentwicklung der cosh- und sinh-Funktionen sieht man, dass nur gerade Terme $(\sigma_i \sigma_j)^{2n}$ für cosh und nur ungerade Terme $(\sigma_i \sigma_j)^{2n+1}$ für sinh auftreten. Da $\sigma_i = \pm 1$ ist $(\sigma_i \sigma_j)^{2n} = 1$ und $(\sigma_i \sigma_j)^{2n+1} = (\sigma_i \sigma_j)$. Dies erlaubt uns die Zustandssumme in folgender Form zu schreiben

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} [\cosh(\beta J) + \sigma_i \sigma_j \sinh(\beta J)] = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} \cosh(\beta J) [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(\beta J)]. \quad (4)$$

Da der cosh-Faktor nicht vom Produkt $\sigma_i \sigma_j$ abhängt, können wir für diesen Faktor in Abhängigkeit der Anzahl der Nächsten-Nachbar-Paare $P(N)$ schreiben. Somit erhalten wir die gesuchte Form

$$Z = [\cosh(\beta J)]^P \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(\beta J)]. \quad (5)$$

Für $N \gg 1$ kann man $P(N)$ mit Hilfe der Koordinationszahl z ausdrücken. Unter Vernachlässigung von Randeffekten hat jeder der N Spins $z = 4$ nächste Nachbarn, wodurch

$$P(N) = \frac{zN}{2} = 2N.$$

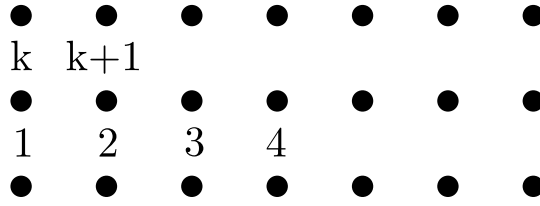


Abbildung 1: Abb. 1

(b) Überlegen Sie sich, dass man Z aus Gl. (2) wie folgt entwickeln kann:

$$Z = 2^N \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{P(N)} \sum_{m=0}^{\infty} C_{2m}(N) \left(\tanh \frac{J}{k_B T} \right)^{2m} \quad (6)$$

Das ist die sogenannte Cluster-Entwicklung des Ising-Modells. Was ist die Bedeutung der Zahlen $C_{2m}(N)$? Bestimmen Sie $C_2(N)$, $C_4(N)$ und $C_6(N)$.

Lösung:

Wir schauen und das Produkt über Nächste-Nachbarn anhand eines Gitterausschnittes (Abb. 1) genauer an. Dies lautet:

$$\begin{aligned} & \prod_{\langle ij \rangle} [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(\beta J)] \\ &= [1 + \sigma_1 \sigma_2 \tanh(\beta J)] \cdot [1 + \sigma_2 \sigma_3 \tanh(\beta J)] \cdot [1 + \sigma_3 \sigma_4 \tanh(\beta J)] \dots \\ & \times [1 + \sigma_1 \sigma_k \tanh(\beta J)] \cdot [1 + \sigma_2 \sigma_{k+1} \tanh(\beta J)] \cdot [1 + \sigma_3 \sigma_{k+2} \tanh(\beta J)] \dots \\ & \times [1 + \sigma_k \sigma_{k+1} \tanh(\beta J)] \cdot [1 + \sigma_{k+1} \sigma_{k+2} \tanh(\beta J)] \dots \end{aligned} \quad (7)$$

Die Zustandsumme kann somit in Potenzen des \tanh ausgedrückt werden. Dies lautet

$$\begin{aligned} Z &= (\cosh[\beta J])^P \sum_{\{\sigma\}} [1 + \tanh(\beta J) (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \dots) \\ & + \tanh^2(\beta J) (\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_3 + \dots) + \tanh^3(\beta J) (\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_3 \sigma_4 + \dots) + \dots] \end{aligned} \quad (8)$$

Jeden einzelnen dieser Beiträge kann man als Cluster bezeichnen, ein Nächste-Nachbar-Paar ist dann ein 2-Spin-Cluster, beispielsweise $\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_3$ ist ein 3-Spin-Cluster usw.. Deshalb wird es als Cluster-Entwicklung bezeichnet. Wegen $\sum_{\sigma_i}^{\pm 1} \sigma_i = 0$, tragen nur Terme aus Gl. (8) bei, die von quadratischer Ordnung in jedem auftretenden σ_i sind. Dies ist nur für geschlossene Cluster aus mind. 4 Nächste-Nachbar-Paare (mit mind. 4 Spins). Daher ist ein Beispiel für einen Beitrag

$$\sum_{\{\sigma\}} \tanh^4(\beta J) \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_{k+1} \sigma_{k+1} \sigma_k \sigma_k \sigma_1 = \sum_{\{\sigma\}} \tanh^4(\beta J). \quad (9)$$

Analog gibt es geschlossene 6, 8, 10,...-Spin-Cluster, die ebenfalls zur Zustandsumme beitragen(auf einem anderen Gitter, z. B. Dreiecksgitter, würde es anders aussehen). Das Produkt über alle Nächste-Nachbar-Paare reduziert sich auf eine Summe über alle geschlossenen Cluster, wobei jedes geschlossene n -Spin-Cluster den gleichen Beitrag liefert. Wir führen also die Zahlen C_n der geschlossenen n -Spin-Cluster ein und schreiben

$$Z = (\cosh[\beta J])^P \sum_{\{\sigma\}} [1 + C_4(N) \tanh^4(\beta J) + C_6(N) \tanh^6(\beta J) + \dots]. \quad (10)$$

Daher folgt weiterhin, dass gilt

$$C_2(N) = 0. \quad (11)$$

Für die Koeffizienten höhere Ordnung nehmen wir analog zu der vorherigen Teilaufgabe an, dass Randeffekte vernachlässigbar sind. Daher folgt für $N \gg 1$ analog zu $P = 2N$, dass gilt

$$C_4(N) = N, \quad C_6(N) = 2N. \quad (12)$$

- (c) Betrachten Sie den Grenzfall hoher Temperaturen $k_B T \gg J$ und berechnen Sie die Wärmekapazität c_V bis zur vierten Ordnung in $J/(k_B T)$.

Lösung:

Die Wärmekapazität wird berechnet mit

$$c_V = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}. \quad (13)$$

Für $k_B T \gg J$ ist $\tanh J/(k_B T) \gg 1$, es ist deshalb ausreichend nur den Term der geschlossenen 4-Spin-Cluster mitzunehmen. Für $N \gg 1$ gilt

$$Z = 2^N [\cosh(\beta J)]^{2N} [1 + N \tanh^4(\beta J)]. \quad (14)$$

Die freie Energie ist

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \ln Z \\ &= -N k_B T \ln 2 - 2N k_B T \ln \cosh\left(\frac{J}{k_B T}\right) - k_B T \ln \left[1 + N \tanh^4\left(\frac{J}{k_B T}\right)\right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Wir entwickeln $(\cosh x, \ln(1+x))$ und $\tanh x$ in $J/(k_B T)$ bis zur vierten Ordnung

$$F \approx -N k_B T \ln 2 - N k_B T \left(\frac{J}{k_B T}\right)^2 - \frac{5N k_B T}{6} \left(\frac{J}{k_B T}\right)^4. \quad (16)$$

Damit folgt für die Wärmekapazität

$$c_V \approx 2N k_B \left(\frac{J}{k_B T}\right)^2 + 10N k_B \left(\frac{J}{k_B T}\right)^4. \quad (17)$$

2. Domänenwände im Ising-Modell:

(6+5+7+7=25 Punkte)

Bemerkung: Die Molekularfeldtheorie des Ising-Modells sagt einen Phasenübergang in einen geordneten Zustand mit einer spontanen Magnetisierung $\langle \sigma \neq 0 \rangle$ bei der kritischen Temperatur T_c voraus. Der bei der Molekularfeldtheorie vorausgesagte Phasenübergang findet in allen Dimensionen $D \geq 2$ statt. Der geordnete Zustand wird durch eine spontane Magnetisierung und die Spin-Spin-Korrelationsfunktion charakterisiert, die für große Distanzen konstant wird. Für $D = 1$ versagt die Molekularfeldtheorie hingegen. Tatsächlich können in einer Dimension keine Phasenübergänge bei endlicher Temperatur stattfinden. In dieser Aufgabe analysieren wir, warum Fluktuationen die Ordnung in eindimensionalen Systemen immer zerstören, in höheren Dimensionen (bei hinreichend niedrigen Temperaturen) dagegen nicht.

- (a) Betrachten Sie ein eindimensionales ($D = 1$) Ising-Modell aus $N \gg 1$ Spins. Nehmen Sie an, dass $\sigma_1 = 1$. Diese Randbedingung garantiert, dass bei $T = 0$ alle Spins nach oben zeigen. Die angeregten Zustände niedrigster Energie sind die mit jeweils einer einzelnen Domänenwand, d.h.

$$\sigma_i = \begin{cases} 1, & i \leq k, \\ -1 & i > k, \end{cases} \quad (18)$$

wobei $1 \leq k \leq N - 1$. Bestimmen Sie die Anzahl der Zustände und die Energie eines Zustandes mit m Domänenwänden. Berechnen Sie die Zustandssumme des Systems als eine Summe über die Anzahl der Domänenwände.

Lösung:

Durch das fixieren des Spins σ_1 auf 1 gibt die Position der Domänenwände sofort an, in welcher Spinkonfiguration das System sich befindet. Die Energie des Zustandes mit m Domänenwände ist

$$E(m, N) = -(N - 1)J + 2Jm. \quad (19)$$

Die Anzahl der Zustände mit m Domänenwände entspricht gerade der Anzahl der Möglichkeiten um m Positionen aus $N - 1$ möglichen Positionen auszuwählen. Dies ist gerade die Definition des Binominalkoeffizienten, wodurch die Anzahl der Zustände durch

$$\Omega(m, N - 1) = \frac{(N - 1)!}{m!(N - m - 1)!} \quad (20)$$

gegeben ist.

Die Zustandessumme für m Domänenwände lautet

$$Z = e^{(N-1)\beta J} \sum_{m=0}^{N-1} e^{-2J\beta m} \Omega(m, N - 1) = e^{(N-1)\beta J} (1 + e^{-2J\beta})^{N-1}. \quad (21)$$

Im thermodynamisches Limes reproduzieren wir die Resultate aus Blatt 11.

$$Z = (2 \cosh \beta J)^N. \quad (22)$$

- (b) In einer Dimension beeinflusst die Anwesenheit einer Domänenwand die Spins in beliebig weiter Entfernung. Insbesondere ist $\sigma_N = -1$ in jeder Konfiguration mit einer Domänenwand unabhängig von N . Finden Sie für Konfigurationen mit einer Domänenwand die durchschnittliche Anzahl von Spins N_\downarrow , die nach unten zeigen.

Lösung:

Wir gehen davon aus, dass wir eine Domänenwand zwischen Spin k und $k + 1$. Das bedeutet, dass wir genau $N - k$ Spin-unten-Zustände im System haben. Die durchschnittliche Anzahl von Spin down Zuständen ist

$$\begin{aligned} N_\downarrow &= \frac{\exp[(N - 1)\beta J - 2J\beta] \sum_{k=1}^{N-1} (N - k)}{\exp[(N - 1)J\beta] + (N - 1) \exp[(N - 1)\beta J - 2\beta J]} \\ &= \frac{\exp(-2J\beta)N(N - 1)}{2[1 + (N - 1) \exp(-2\beta J)]}. \end{aligned} \quad (23)$$

Offensichtlich ist, $N_\downarrow \rightarrow 1/2N$ in thermodynamischen Regime ($N \rightarrow \infty$). Dies deutet auf die Abwesenheit von langreichweitiger Ordnung im System hin.

- (c) Berechnen Sie die Spin-Spin-Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle$ zwischen den Enden des Systems bei endlicher Temperatur als Summe über die Anzahl der Domänenwände. Zeigen Sie, dass der Zerfall für $N \gg 1$ wie $\exp(-N/\xi)$ geht und finden Sie die Korrelationslänge ξ . Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Ergebnis aus der Vorlesung.

Lösung

Der Spin σ_1 ist festgehalten in unserem System. Auf der anderen Seite ist der Zustand mit m Domänenwände $\sigma_N = (-1)^m$. Daher

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1 \sigma_N \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{m=0}^{N-1} (-1)^m \exp[(N-1)\beta J - 2Jm\beta] \Omega(m, N) \\ &= \frac{1}{Z} \exp[(N-1)\beta J] [1 - \exp(-2J\beta)]^{N-1}. \end{aligned} \quad (24)$$

Im thermodynamischen Limes

$$\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle = (\tanh J/k_B T)^N = e^{-N/\xi}, \quad \xi = -\frac{1}{\ln \tanh J/k_B T}. \quad (25)$$

Das ist genau das Ergebnis aus der Vorlesung.

- (d) Betrachten Sie nun das 2D-Ising-Modell aus Aufgabe 1 mit $N \gg 1$ und nehmen Sie an, dass die Spins an allen vier Rändern nach oben zeigen. Das 2D-Ising-Modell kann auch formuliert werden, in dem man Domänen betrachtet. Die einfachste Anregung (Spin-Umklapp) kann als eine kürzest mögliche Domänenwand (der Länge $\ell = 4$) angesehen werden. Berechnen Sie die durchschnittliche Anzahl von Spins, die nach unten zeigen, wobei nur die kürzesten Domänenwände ($\ell = 4$) betrachtet werden sollen. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Ergebnis der Teilaufgabe 2(b).

Lösung:

Die Anregung mit der kleinsten Energie ist in 2D gerade, wenn ein einzelner Spin geflippt wird. Die Energie eines solchen Zustandes (wir konzentrieren uns auf das thermodynamische Regime und vernachlässigen die Randterme in der Energie) ist

$$E_1 = -2NJ + 8J. \quad (26)$$

Offensichtlich ist N_\downarrow eine extensive Größe und sollte daher proportional zu N sein. Wir betrachten eine beliebige Anzahl m von Domänen mit einem einzelnen Spin ($\ell = 4$) und unter Vernachlässigung der Wechselwirkung zwischen diesen. Diese Betrachtung ist analog zum idealen Gas. Wir erhalten damit

$$Z \simeq e^{2NJ\beta} \sum_{m=0}^N \Omega(m, N) e^{-8m\beta J} = e^{2NJ\beta} (1 + e^{-8\beta J})^N \xrightarrow{\beta J \gg 1} \exp(2N\beta J + N e^{-8\beta J}), \quad (27)$$

$$\begin{aligned} N_\downarrow &\simeq \frac{1}{Z} e^{2NJ\beta} \sum_{m=0}^N m \Omega(m, N) e^{-8m\beta J} = \frac{1}{Z} e^{2NJ\beta} \left(-\frac{1}{8J}\right) \frac{\partial}{\partial \beta} (e^{-2NJ\beta} Z) \\ &= \frac{N e^{-8\beta J}}{1 + e^{-8\beta J}} \xrightarrow{\beta J \gg 1} N e^{-8\beta J}. \end{aligned} \quad (28)$$

Wir finden, dass $N_\downarrow/N \ll 1$ für tiefe Temperaturen gilt, im Gegensatz zum 1D-Fall von Teilaufgabe 2(b).

5 Bonuspunkte: Nun wollen wir wissen, ob längere Domänenwände bei niedrigen T wichtig werden. Geben Sie eine obere Schranke für den Beitrag der Domänenwände der Länge ℓ zur Zustandssumme an, um diese Frage zu beantworten.

Lösung:

Bisher haben wir Domänen mit mehr als einem umgeklappten Spin (oder äquivalent mit $\ell > 4$) vernachlässigt. Nun werden wir zeigen, dass diese Konfigurationen für tiefe Temperaturen vernachlässigbar sind. Die Energie einer Domänenwand der Länge ℓ ist $2\ell J$. Wie viele verschiedene Domänenwände existieren in diesem System? Wir können das wie folgt abschätzen. Schritt für Schritt bauen wir eine Domänenwand an einer beliebigen Stellen auf. An jedem Punkt haben wir 3 Möglichkeiten fortzufahren (links, rechts und gerade aus). Zudem haben wir N Startpunkte. Daher können wir die Anzahl an verschiedenen Domänenwänden mit $3^\ell N$ abschätzen. Diese Abschätzung vernachlässigt, dass die Domänenwand immer geschlossen ist und nach ℓ Schritten wieder am Startpunkt sein sollte. Daher haben wir eine Abschätzung für eine einzelne Domänenwand der Länge ℓ in der Zustandssumme

$$\delta Z_\ell < 3^\ell e^{-2\ell J\beta} N. \quad (29)$$

Wir finden, dass für tiefe Temperaturen Z_ℓ monoton als eine Funktion von ℓ abfällt. Daher sind die einfachen Einzelspindomänen in der Tat am wichtigsten.

3. 3D-Ising-Modell: Landau-Funktional: (8+9+8=25 Punkte)

Betrachten Sie ein Ising-Modell aus $N \gg 1$ Spins auf einem dreidimensionalen kubischen Gitter (Gitterkonstante a) mit einer generischen Spin-Spin-Wechselwirkung $J_{ij} = J_{ji}$:

$$\hat{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (30)$$

(a) Die Wechselwirkung J_{ij} kann als eine invertierbare $N \times N$ -Matrix \hat{J} aufgefasst werden. Entkoppeln Sie die Wechselwirkung mit Hilfe der Hubbard-Stratonovich-Transformation

$$e^{-\beta \hat{H}} = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_i d\varphi_i\right) \exp \left[-\frac{\beta}{2} \sum_{ij} (\varphi_i + 2\sqrt{2} \sigma_i) J_{ij} \varphi_j \right]. \quad (31)$$

Führen Sie die Summen über $\sigma_i = \pm 1$ in der Zustandssumme aus. Entwickeln Sie dann den Exponenten in der Form $\ln(\cosh z) \simeq z^2/2 - z^4/12$ für kleine φ_i .

Lösung:

Analog zu Aufgabe 1 sind die Mikrozustände sind $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$. Wir betrachten die Zustandssumme:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j} \quad (32)$$

Mit der Definition der Hubbard-Stratonovich-Transformation (31) lautet die Zustandssumme

$$Z = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \sum_{\{\sigma\}} \int \left(\prod_i d\varphi_i\right) \exp \left[-\frac{\beta}{2} \sum_{ij} (\varphi_i + 2\sqrt{2} \sigma_i) J_{ij} \varphi_j \right]. \quad (33)$$

Wir können nun die Summe über die Mikrozustände ausführen. Mit $\sigma_i = \pm 1$ führt dies zu

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_i d\varphi_i\right) \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_{ij} \varphi_i J_{ij} \varphi_j\right) 2^N \prod_i \cosh\left(\sum_j \sqrt{2}\beta J_{ij} \varphi_j\right) \\ &= \left(\frac{8\beta}{\pi}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_i d\varphi_i\right) \exp\left[-\frac{\beta}{2} \sum_{ij} \varphi_i J_{ij} \varphi_j + \sum_i \ln \cosh\left(\sum_j \sqrt{2}\beta J_{ij} \varphi_j\right)\right] \end{aligned} \quad (34)$$

Nun können wir den $\ln \cosh$ -Term im Exponenten der Zustandssumme mit zur vierten Ordnung in J_{ij} entwickeln. Dies führt zu

$$\begin{aligned} \sum_i \ln \cosh\left(\sum_j \sqrt{2}\beta J_{ij} \varphi_j\right) &= \frac{2\beta^2}{2} \sum_i \left(\sum_j J_{ij} \varphi_j\right)^2 - \frac{4\beta^4}{12} \sum_i \left(\sum_j J_{ij} \varphi_j\right)^4 \\ &= \beta^2 \sum_{i,j} \varphi_i \left(\sum_l J_{li} J_{lj}\right) \varphi_j - \frac{\beta^4}{3} \sum_{i,j,l,m,n} J_{ij} J_{il} J_{im} J_{in} \varphi_j \varphi_l \varphi_m \varphi_n. \end{aligned} \quad (35)$$

Damit kann man die Zustandssumme schreiben als (mit $J_{ij} = J_{ji}$)

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{8\beta}{\pi}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_i d\varphi_i\right) \exp\left[-\frac{\beta}{2} \left(\sum_{ij} \varphi_i J_{ij} - 2\beta \sum_l J_{il} J_{lj}\right) \varphi_j\right] \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{\beta^4}{3} \sum_{i,j,l,m,n} J_{ij} J_{il} J_{im} J_{in} \varphi_j \varphi_l \varphi_m \varphi_n\right). \end{aligned} \quad (36)$$

- (b) Transformieren Sie $\varphi_i = \varphi(\vec{r}_i) \rightarrow \varphi_{\vec{k}}$ und analog $J_{ij} = J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \rightarrow J_{\vec{k}}$ in den diskreten Fourierraum. Nehmen Sie an, dass die Elemente J_{ij} nur für Nächster-Nachbar-Paare von Null verschieden sind und entwickeln Sie $J_{\vec{k}}$ bis zur zweiten Ordnung in $ka \ll 1$. Bestimmen Sie Landau-Funktional $\mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}]$ in

$$Z \propto \int \left(\prod_{\vec{k}} d\varphi_{\vec{k}}\right) \exp(-\beta \mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}]), \quad (37)$$

wobei im φ^4 -Term Sie nur den \vec{k} -unabhängigen Beitrag in $J_{\vec{k}}$ behalten.

Lösung:

Die diskrete Fourier-Transformation ist

$$\varphi_i = \varphi_{\vec{r}_i} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_i}, \quad J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (38)$$

und hat die Eigenschaft

$$\sum_i e^{i\vec{k}\vec{r}_i} = N\delta_{\vec{k}}.$$

Analog gibt es N mögliche Werte für \vec{k} , wodurch

$$\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_i} = N\delta_{\vec{r}_i}$$

gilt. Der erste quadratische Term kann geschrieben werden als

$$\begin{aligned}\sum_{i,j} \varphi_i J_{ij} \varphi_j &= \frac{1}{N^3} \sum_{i,j} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{k}'} \varphi_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_i} J_{\vec{q}} e^{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \varphi_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\vec{r}_j} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{k}'} \delta_{\vec{k}+\vec{q}} \delta_{\vec{k}'-\vec{q}} \varphi_{\vec{k}} J_{\vec{q}} \varphi_{\vec{k}'} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} J_{\vec{k}} \varphi_{-\vec{k}}.\end{aligned}\quad (39)$$

Wegen $J_{ij} = J_{ji}$ gilt auch $J_{-\vec{k}} = J_{\vec{k}}$. Analog wird die Rechnung für den zweiten quadratischen Term durchgeführt. Dies ergibt

$$\sum_{i,j} \varphi_i \left(-2\beta \sum_l J_{il} J_{jl} \right) \varphi_j = -\frac{2\beta}{N} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} J_{\vec{k}}^2 \varphi_{-\vec{k}}. \quad (40)$$

Der φ^4 -Term lautet

$$\begin{aligned}-\frac{\beta^4}{3} \sum_{i,j,l,m,n} J_{ij} J_{il} J_{im} J_{in} \varphi_j \varphi_l \varphi_m \varphi_n \\ = -\frac{\beta^4}{3N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} J_{\vec{k}_1} J_{\vec{k}_2} J_{\vec{k}_3} J_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3} \varphi_{\vec{k}_1} \varphi_{\vec{k}_2} \varphi_{\vec{k}_3} \varphi_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3}.\end{aligned}\quad (41)$$

Damit können wir die Zustandsumme in der Form von Gl. (37) schreiben

$$Z \propto \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_{\vec{k}} d\varphi_{\vec{k}} \right) \exp \{ -\beta \mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}] \}, \quad (42)$$

wobei

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}] &= \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} (J_{\vec{k}} - 2\beta J_{\vec{k}}^2) \varphi_{-\vec{k}} \\ &+ \frac{\beta^4}{3N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} J_{\vec{k}_1} J_{\vec{k}_2} J_{\vec{k}_3} J_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3} \varphi_{\vec{k}_1} \varphi_{\vec{k}_2} \varphi_{\vec{k}_3} \varphi_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3}.\end{aligned}\quad (43)$$

Die Wechselwirkung geschrieben werden als

$$\begin{aligned}J_{\vec{k}} &= J (e^{-ik_x a} + e^{ik_x a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_z a} + e^{ik_z a}) \\ &= 2J [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)].\end{aligned}\quad (44)$$

Hierbei wurde verwendet, dass die Wechselwirkung nur für Nächste-Nachbar-Paare von Null verschieden ist. Also tragen nur Werte $|\vec{r}_{ij}| = a$ ($a =$ Gitterkonstante) bei. Im Limes großer Wellenlängen $k_x, k_y, k_z \ll 1/a$ können wir die Wechselwirkung nun entwickeln ($\cos x = 1 - \frac{x^2}{2}$) und erhalten

$$J_{\vec{k}} \approx 2J \left(3 - \frac{\vec{k}^2 a^2}{2} \right) = J_0 \left(1 - \frac{a^2}{6} \vec{k}^2 \right), \quad (45)$$

wobei $J_0 = 6J$.

Der quadratische Term in $F[\varphi]$ kann geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} (J_{\vec{k}} - 2\beta J_{\vec{k}}^2) \varphi_{-\vec{k}} &= \frac{J_0}{2N} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} \left[1 - \frac{a^2}{6} \vec{k}^2 - 2\beta J_0 \left(1 - \frac{a^2}{6} \vec{k}^2 \right)^2 \right] \varphi_{-\vec{k}} \\
&= \frac{J_0}{2N} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} \left[1 - 2\beta J_0 - \frac{a^2}{6} (1 - 4\beta J_0)^2 \vec{k}^2 \right] \varphi_{-\vec{k}} \\
&= \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} \left(t + K \vec{k}^2 \right) \varphi_{-\vec{k}}, \tag{46}
\end{aligned}$$

wobei wir

$$t = \frac{J_0 V}{N} (1 - 2\beta J_0) = \frac{T - T_c}{T}, \quad K = \frac{J_0 V a^2}{6N} (1 - 4\beta J_0)^2$$

eingeführt haben. Der Wechselwirkungs im φ^4 -Term vereinfacht sich nun zu

$$J_{\vec{k}_1} J_{\vec{k}_2} J_{\vec{k}_3} J_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3} = J_0^4. \tag{47}$$

(c) Benutzen Sie nun die kontinuierliche Fourier-Transformation

$$\varphi_{\vec{k}} = \int \frac{d^3 r}{V} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \varphi(\vec{r}),$$

um wieder in den Ortsraum zu transformieren und zeigen Sie, dass das Landau-Funktional die folgende Form hat:

$$\mathcal{F}[\varphi(\vec{r})] = \int d^3 r \left[\frac{t}{2} \varphi^2(\vec{r}) + b \varphi^4(\vec{r}) + \frac{K}{2} |\vec{\nabla} \varphi(\vec{r})|^2 \right]. \tag{48}$$

Geben Sie t , b und K an.

Lösung:

Wir benutzen die kontinuierliche Fourier-Transformation

$$\varphi_{\vec{k}} = \int \frac{d^3 r}{V} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \varphi(\vec{r}),$$

zunächst für den quadratischen Term und finden

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int d^3 r \int d^3 r' \varphi(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left(t + K \vec{k}^2 \right) \varphi(\vec{r}') e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \\
&= \frac{1}{2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int d^3 r \int d^3 r' \varphi(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \left(t - K \nabla_{\vec{r}'}^2 \right) \varphi(\vec{r}') e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \\
&= \frac{1}{2} \int d^3 r \varphi(\vec{r}) \left(t - K \nabla_{\vec{r}}^2 \right) \varphi(\vec{r}) \\
&= \frac{1}{2} \int d^3 r \left[t \varphi^2(\vec{r}) + K |\nabla_{\vec{r}} \varphi(\vec{r})|^2 - K \nabla_{\vec{r}}^2 \varphi^2(\vec{r}) \right] \\
&= \frac{1}{2} \int d^3 r \left[t \varphi^2(\vec{r}) + K |\nabla_{\vec{r}} \varphi(\vec{r})|^2 \right]. \tag{49}
\end{aligned}$$

Der Term $\int d^3 r \nabla^2 \varphi^2(\vec{r})$ ist durch die totale Ableitung ein Randterm und verwindet im unendlichen.

Der φ^4 -Term ist im Ortsraum gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{\beta^4 J_0^4}{3N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} \varphi_{\vec{k}_1} \varphi_{\vec{k}_2} \varphi_{\vec{k}_3} \varphi_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3} &= \frac{\beta^3 J_0^4 V^3}{3N} \int \frac{d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 k_3}{(2\pi)^9} \varphi_{\vec{k}_1} \varphi_{\vec{k}_2} \varphi_{\vec{k}_3} \varphi_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3} \\ &= \frac{\beta^3 J_0^4}{3NV} \int d^3 r \varphi^4(\vec{r}). \end{aligned} \quad (50)$$

Das Funktional lautet daher

$$F[\varphi(\vec{r})] = \int d^3 r \left[\frac{t}{2} \varphi^2(\vec{r}) + \frac{\beta^3 J_0^4}{3NV} \varphi^4(\vec{r}) + \frac{K}{2} |\nabla_{\vec{r}} \varphi(\vec{r})|^2 \right]. \quad (51)$$

Damit finden wir

$$t = \frac{J_0}{NV} (1 - 2\beta J_0) = \frac{T - T_c}{T}, \quad b = \frac{\beta^3 J_0^4}{3NV}, \quad K = \frac{J_0 a^2}{6NV} (1 - 4\beta J_0)^2. \quad (52)$$

Die kritische Temperatur ist gegeben durch

$$T_c = \frac{2J_0}{k_B}. \quad (53)$$