KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE | INSTITUT FÜR THEORIE DER KONDENSIERTEN MATERIE

Moderne Theoretische Physik IIIb (Theorie Fb) **Sommersemester 2019**

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Dr. Stefan Rex

Blatt 3
Besprechung: 17.05.2019

---

1. Molekularfeld-Näherung für $S > 1/2$: (10+20+20=50 Punkte)

Betrachten Sie das Heisenberg-Modell aus $N \gg 1$ Spins mit $S > 1/2$ in einem dreidimensionalen kubischen Gitter. Der Hamilton-Operator lautet ($J > 0$):

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j, \tag{1}$$

wobei die Summe über alle Paare der nächsten Nachbarn geht. Beachten Sie, dass $\vec{s}_i = (s_i^x, s_i^y, s_i^z)$ ein quantenmechanischer Operator mit $\vec{s}^2 = S(S+1)$ ist.

(a) Führen Sie die Molekularfeld-Näherung für H durch und bestimmen Sie den Zusammenhang zwischen dem molekularen Feld $\vec{B}_{\text{eff}}$, das über

$$H \simeq H_{\text{MF}} = -\vec{B}_{\text{eff}} \cdot \sum_i \vec{s}_i + E_0$$

definiert ist (E_0 ist eine Konstante, kein Operator), und dem mittleren Spin $\langle s_i^z \rangle$. Geben Sie die Zustandssumme Z_{MF} für H_{MF} an.

(b) Leiten Sie die Selbstkonsistenzgleichung für die Magnetisierung M her. Finden Sie die Übergangstemperatur T_c in der Molekularfeld-Näherung.

(c) Ausgehend von H_{MF} leiten Sie das Freie-Energiedichte-Funktional

$$f(\varphi) = f_N + \frac{t}{2}\,\varphi^2 + b\,\varphi^4 \tag{2}$$

für das System in der Nähe des Übergangs her. Bestimmen Sie f_N, t und b.

2. Landau-Funktional für das Ising-Modell: (15+20+15=50 Punkte)

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

$$H = -\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \tag{3}$$

(a) Die Spin-Spin-Wechselwirkung kann als eine invertierbare $N \times N$-Matrix $\hat{J}$ aufgefasst werden. Verwenden Sie die Hubbard-Stratonovich-Transformation

$$e^{-\beta H(\sigma_1,\ldots,\sigma_N)} = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_i d\varphi_i\right) \exp\left[-\frac{\beta}{2}\sum_{ij}\left(\varphi_i + 2\sqrt{2}\,\sigma_i\right) J_{ij}\,\varphi_j\right].$$

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.

(b) Nehmen Sie nun an, dass die Elemente J_{ij} nur für Nächster-Nachbar-Paare von Null verschieden sind. Transformieren Sie $\varphi_i = \varphi(\vec{r}_i) \to \varphi_{\vec{k}}$ und analog $J_{ij} = J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \to J_{\vec{k}}$ in den diskreten Fourierraum. Vereinfachen Sie $J_{\vec{k}}$ im Limes k_x, k_y, $k_z \ll 1/a$. Bestimmen Sie das Landau-Funktional $\mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}]$ in

$$Z \simeq \left(\frac{2\pi\beta}{N^2}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_{\vec{k}} d\varphi_{\vec{k}}\right) \exp\left\{-\beta\mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}]\right\}, \tag{4}$$

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

(c) Benutzen Sie nun die kontinuierliche Fourier-Transformation

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

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

$$\mathcal{F}[\varphi(\vec{r})] = \int d^3r \left[\frac{t}{2}\varphi^2(\vec{r}) + b\varphi^2(\vec{r}) + \frac{K}{2}\left|\vec{\nabla}\varphi(\vec{r})\right|^2\right]. \tag{5}$$

Bestimmen Sie t, b und K. Geben Sie die kritische Temperatur T_c an und finden Sie die Wärmekapazität in der Nähe des Übergangs.

3. Bonusaufgabe: (10 Bonuspunkte)

Betrachten Sie eine vereinfachte Theorie des Phasenübergangs in einem System von N Ionen mit Spin 1/2. Nehmen Sie an, dass das System bei $T = 0$ ferromagnetisch und bei höheren endlichen Temperaturen ($T > T_0$) paramagnetisch ist.

Nach dieser Theorie ist die Wärmekapazität in Abhängigkeit von der Temperatur als

$$c = \begin{cases} c_{\max}\left(\dfrac{2T}{T_0} - 1\right), & \dfrac{T_0}{2} < T < T_0, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{6}$$

gegeben.

Finden Sie $c_{\max}$ als Funktion von N.