

Übungen zur Theoretischen Physik Fb SS 18

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. NarozhnyBlatt 3
Lösungsvorschlag

1. Anharmonischer Oscillator:

(a) *Ungestörtes System:*

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2 = \hbar\omega_0(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$$

und

$$Z_0 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}, \quad E_n = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2}), \quad Z_0 = \frac{e^{-\beta\hbar\omega_0/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}}$$

$$F_0 = -kT \ln(Z_0) = \frac{\hbar\omega_0}{2} + kT \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega_0})$$

Freie Energie in 1. Ordnung:

$$F_1 = \text{Tr}(\hat{W}_0\hat{V}) = \frac{1}{Z_0} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \langle n|\hat{V}|n\rangle$$

Wir müssen jetzt \hat{V} durch \hat{a}, \hat{a}^\dagger ausdrücken: mit $\hat{x} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0}\right)^{1/2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$ folgt

$$\hat{x}^3 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0}\right)^{3/2} (\hat{a}^{\dagger 3} + \hat{a}^{\dagger 2}\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^3 + \hat{a}^\dagger\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2\hat{a}^\dagger)$$

Die Wirkung der \hat{a}, \hat{a}^\dagger ist bekannt,

$\hat{a} n\rangle$	$=$	$\sqrt{n} n-1\rangle$
$\hat{a}^\dagger n\rangle$	$=$	$\sqrt{n+1} n+1\rangle$

Wird der Ausdruck für \hat{x}^3 in $\langle n|\hat{V}|n\rangle = \alpha\langle n|\hat{x}^3|n\rangle$ eingesetzt, so ergeben sich eine Reihe von Termen, aber in keinem dieser Terme wird der Ausgangszustand $|n\rangle$ wieder hergestellt, so daß

$$\langle n|\hat{x}^3|n\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\langle \hat{V} \rangle_1 = F_1 = 0}$$

Man muß also mind. in 2. Ordnung rechnen, um eine nichttriviale Korrektur zu F_0 zu bekommen.

- (b) *Mittlere Ausdehnung in Störungstheorie:* $\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{x} \rangle_0 + \langle \hat{x} \rangle_1 + \dots$
Ungestörtes System:

$$\langle \hat{x} \rangle_0 = \text{Tr}(\hat{W}_0 \hat{x}) = \frac{1}{Z_0} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{1/2} \underbrace{\langle n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n \rangle}_{=0} = 0$$

Das war klar, denn \hat{x} ist ja die Auslenkung aus der Ruhelage des harmonischen Oszillators \hat{H}_0 .

1. Ordnung:

$$\langle \hat{x} \rangle_1 = \text{Tr}(\hat{W}_1 \hat{x}) = - \int_0^\beta d\tau \frac{1}{Z_0} \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta \hat{H}_0} [e^{\tau \hat{H}_0} \hat{V} e^{-\tau \hat{H}_0} - \underbrace{\langle \hat{V} \rangle_0}_{=0}] \hat{x} | n \rangle$$

Jetzt eine $\hat{1}$ vor dem \hat{x} einschieben und alle $e^{\dots \hat{H}_0}$ auf die $|n\rangle$ -Zustände anwenden,

$$\langle \hat{x} \rangle_1 = - \frac{1}{Z_0} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \int_0^\beta d\tau e^{\tau(E_n - E_m)} \langle n | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{x} | n \rangle$$

Ausführen des $\int d\tau$,

$$\langle \hat{x} \rangle_1 = \frac{1}{Z_0} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{E_n - E_m} \langle n | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{x} | n \rangle$$

Im 1. Term $\sim e^{-\beta E_m}$ kann man noch die Variablen umbenennen, $n \leftrightarrow m$, sodass

$$\boxed{\langle \hat{x} \rangle_1 = \frac{1}{Z_0} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m} [\langle m | \hat{V} | n \rangle \langle n | \hat{x} | m \rangle + \underbrace{\langle n | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{x} | n \rangle}_{= (\langle m | \hat{V} | n \rangle \langle n | \hat{x} | m \rangle)^*}]}$$

Das Matrixelement $\langle n | \hat{x} | m \rangle$ vereinfacht die endlosen Summen erstmal:

$$\langle n | \hat{x} | m \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{1/2} \langle n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | m \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{1/2} \left(\langle n | m - 1 \rangle \sqrt{m} + \langle n | m + 1 \rangle \sqrt{m + 1} \right)$$

Damit wird die n -Summe eliminiert, und es bleibt übrig:

$$\langle \hat{x} \rangle_1 = \frac{\sqrt{\hbar/2m\omega_0}}{Z_0} \left[\sum_{m=1}^{\infty} \sqrt{m} \frac{e^{-\beta E_{m-1}}}{E_{m-1} - E_m} \langle m | \hat{V} | m - 1 \rangle + \sum_{m=0}^{\infty} \sqrt{m+1} \frac{e^{-\beta E_{m+1}}}{E_{m+1} - E_m} \langle m | \hat{V} | m + 1 \rangle \right] + \text{komplex konj.}$$

In der ersten Zeile ersetzen wir die Summationsvariable durch $\bar{m} = m - 1$, $\bar{m} = 0, 1, 2, \dots$ und nennen diese dann wieder m , um die beiden Summen gleich zu machen. Außerdem kann man $E_{m+1} = E_m + \hbar\omega_0$ einsetzen,

$$\langle \hat{x} \rangle_1 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{1/2} \frac{\alpha}{\hbar\omega_0} \frac{1}{Z_0} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta E_{m+1}} \sqrt{m+1} [\langle m | \hat{x}^3 | m + 1 \rangle - \langle m + 1 | \hat{x}^3 | m \rangle e^{\beta \hbar\omega_0}] + \text{komp.konj.}$$

Von den Termen in \hat{x}^3 tragen nur wenige zu dem Matrixelement bei:

$$\langle m+1 | \hat{x}^3 | m \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{3/2} \underbrace{\langle m+1 | \hat{a}^{\dagger 2} \hat{a} + \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \hat{a}^{\dagger} + \hat{a} \hat{a}^{\dagger 2} | m \rangle}_{\langle m+1 | m+1 \rangle \sqrt{m+1} (m+1) 3}$$

Damit ergibt sich dann endlich

$$\langle \hat{x} \rangle_1 = -12 \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^2 \frac{\alpha}{\hbar\omega_0} \frac{\sinh(\beta\hbar\omega_0/2)}{Z_0} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)^2 e^{-\beta\hbar\omega_0(m+1)}$$

Die Summe kann über den Ableitungstrick ausgeführt werden: mit $x \equiv -\beta\hbar\omega_0$ ist

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} (m+1)^2 e^{-\beta\hbar\omega_0(m+1)} \\ = \sum_{n=0}^{\infty} (n)^2 e^{-\beta\hbar\omega_0 n} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{x n} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{1}{1-e^x} \right) = \frac{e^x(1+e^x)}{(1-e^x)^3} \end{aligned}$$

Außerdem ist noch $Z_0 = \frac{e^{x/2}}{1-e^x}$ einzusetzen, also

$$\frac{1}{Z_0} \sum_{n=0}^{\infty} n^2 e^{x n} = \frac{e^{x/2}(1+e^x)}{(1-e^x)^2} = \frac{2 \cosh(x/2)}{4 \sinh^2(x/2)} = \frac{\coth(x/2)}{2 \sinh(x/2)}$$

Das Ergebnis lautet damit:

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{x} \rangle_1 = -6 \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^2 \frac{\alpha}{\hbar\omega_0} \coth\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right)$$

Wenn man das anharmonische Potential $\frac{1}{2}m\omega_0 x^2 + \alpha x^3$ für $\alpha < 0$ plottet, wird klar, daß sich der Nullpunkt der Schwingung nach rechts (positive x) verlagern sollte. In der Tat ist $\langle \hat{x} \rangle > 0$. $\langle \hat{x} \rangle$ ist endlich für $T = 0$ (endliche Ausdehnung der Grundzustandswellenfunktion) und nimmt mit T zu, weil immer höhere Zustände in dem bei positiven x abgeflachten Potential thermisch angeregt werden.

Man beachte: Das Ganze macht natürlich nur Sinn solange $\langle \hat{x} \rangle \ll 1$, denn es handelt sich hier ja um Störungstheorie.

2. Molekularfeldtheorie des Ising-Modells:

Ising-Modell aus N Spins ($\sigma_i = \pm 1$) mit Magnetfeld H und unendlicher Reichweite der Wechselwirkung ($J > 0$):

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1)$$

Die Summe im ersten Term läuft über *alle* Spinpaare. Da beliebige Konstanten zu \mathcal{H} addiert werden dürfen, können auch Terme mit $i = j$ in die Summe $\sum_{i,j}$ mit dazu genommen werden.

Im 1D-Ising-Modell hat jeder Spin 2 Nachbarn, in 2D 4 usw., in diesem Sinn kann man das Modell (1) für $N \gg 1$ als „unendlich“-dimensionales Ising-Modell auffassen. Die Rechnungen in dieser Aufgabe und der Vergleich mit der Molekularfeldtheorie zeigen, dass in diesem Fall die Molekularfeldtheorie (mean field theory) exakte Ergebnisse liefert.

- (a) Wir benutzen die auf dem Blatt angegebene Transformation, eine Hubbard-Stratonovich-Transformation, um die Wechselwirkungsterme in der Zustandssumme zu entkoppeln:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\beta H \sum_i \sigma_i \right] \exp \left[\frac{J\beta}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j \right] \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\beta H \sum_i \sigma_i \right] \exp \left[\frac{J\beta}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 \right] \\ &= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} \int dh \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\beta H \sum_i \sigma_i \right] \exp \left[-\frac{\beta N h^2}{2J} + \beta h \sum_i \sigma_i \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Nach der Transformation ist der Exponent insgesamt nur noch linear in den σ_i und wir können die Summen über $\sigma_i = \pm 1$ unabhängig ausführen:

$$\begin{aligned} Z &= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} \int dh \exp \left[-\frac{\beta N h^2}{2J} \right] \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\beta(h + H) \sum_i \sigma_i \right] \\ &= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} \int dh \exp \left[-\frac{\beta N h^2}{2J} \right] [2 \cosh \beta(h + H)]^N \end{aligned} \quad (3)$$

Wir führen eine Funktion \mathcal{G} ein und schreiben die Zustandssumme als

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} \int dh \exp[-\beta \mathcal{G}(H, T, h)] \quad (4)$$

$$\mathcal{G}(H, T, h) = \frac{N h^2}{2J} - k_B T N \ln [2 \cosh \beta(h + H)] \quad (5)$$

- (b) Wir analysieren den Integranden in (4) bzw. den Exponenten ($-\beta \mathcal{G}$). Der Integrand wird gerade dann maximal wenn der Exponent minimal ist, wir suchen also das

Minimum von \mathcal{G} . Aus der Ableitung nach h erhalten wir die Gleichung für das Minimum $h_0(H, T)$ von \mathcal{G} :

$$\frac{h_0(T, H)}{J} = \tanh \beta(h_0(T, H) + H) \quad (6)$$

Durch Vergleich mit der Selbstkonsistenzgleichung der Molekularfeldtheorie des Heisenberg-Modells aus der Vorlesung,

$$\frac{H_{\text{eff}} - H}{J} = \tanh \beta H_{\text{eff}} , \quad (7)$$

können wir das effektive Feld als $H_{\text{eff}} = h_0(T, H) + H$ identifizieren. Die Größe $h_0(T, H)$ ist also gerade das Feld, das jeder Spin aufgrund der Polarisierung der anderen Spins spürt.

Noch ein paar Details zu den Lösungen der Gleichung (6) (wird auch in der Vorlesung besprochen). In der Aufgabe ist das externe Magnetfeld $H > 0$, zur Veranschaulichung besprechen wir trotzdem zuerst den Fall $H = 0$:

- $H = 0$: Die Gleichung ist dann

$$\frac{h_0}{J} = \tanh \beta h_0 . \quad (8)$$

Die Lösungen kann man sich klarmachen, indem man beide Seiten der Gleichung als Funktion von h_0 plottet.

Für hohe Temperaturen, $\beta J < 1$, gibt es nur die triviale Lösung $h_0 = 0$. Aufgrund der starken thermischen Fluktuationen der Spins verschwindet in diesem Fall der Beitrag der anderen Spins zum effektiven Feld eines einzelnen Spins.

Für $\beta J > 1$ findet man zusätzlich zur trivialen Lösung die Lösungen $\pm h_0 \neq 0$. Die Funktion \mathcal{G} hat zwei entartete Minima bei $\pm h_0$.

- $H \neq 0$: Die rechte und linke Seite der Gleichung (6) sind für unterschiedliche Regimes in den Schaubildern geplottet.

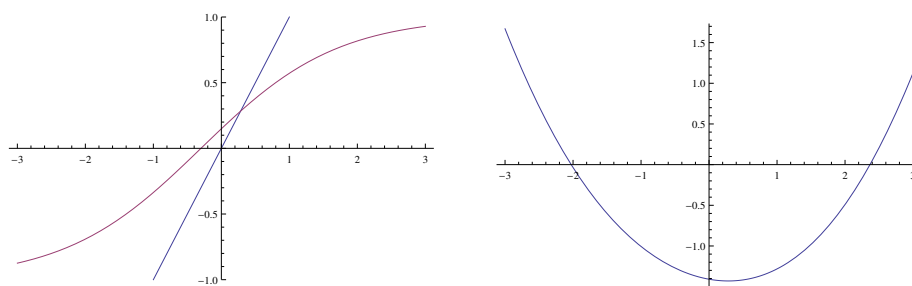


Abbildung 1: Graphische Lösung der Sattelpunktgleichung (links) und die Funktion \mathcal{G} (rechts) im endlichen äußeren Feld $H > 0$ bei hohen Temperaturen $J\beta < 1$.

Für hohe Temperaturen $\beta J < 1$ gibt es eine Lösung mit einem $h_0 > 0$, bei der \mathcal{G} ein Minimum hat. Das endliche h_0 wird durch die Polarisierung der Spins durch das äußere Magnetfeld erzeugt (Abb. 1).

Für kleine Temperaturen und kleines äußeres Feld H hat \mathcal{G} wieder zwei Minima, wobei das Minimum zum größeren Wert von h_0 tiefer liegt (Abb. 2).

Im letzten Fall ist das äußere Magnetfeld groß, so dass wieder nur eine Lösung $h_0 > 0$ existiert, dann hat \mathcal{G} wieder nur ein Minimum (Abb. 3).

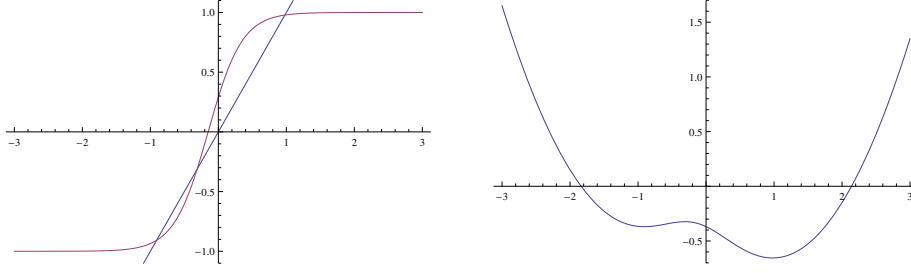


Abbildung 2: Graphische Lösung der Sattelpunktgleichung (links) und die Funktion \mathcal{G} (rechts) im kleinen äußeren Feld bei niedrigen Temperaturen.

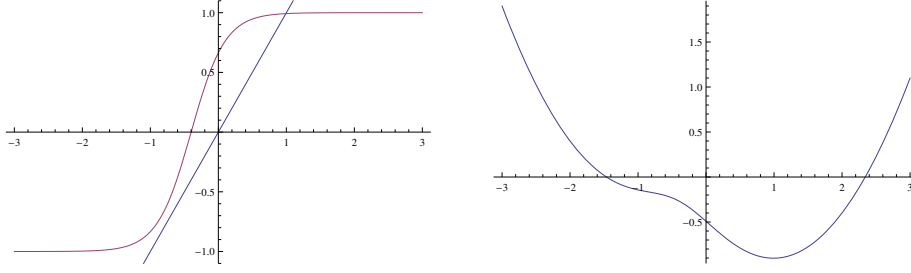


Abbildung 3: Graphische Lösung der Sattelpunktgleichung (links) und die Funktion \mathcal{G} (rechts) bei relativ großem äußeren Feld bei niedrigen Temperaturen.

- (c) h_0 bezeichne jetzt ausschließlich das globale Minimum von \mathcal{G} . An der Stelle $h = h_0(T, H)$ definieren wir

$$\tilde{\mathcal{G}}(T, H) = \mathcal{G}(h_0(T, H), T, H) = \frac{N h_0^2(T, H)}{2J} - k_B T N \ln [2 \cosh \beta(h_0(T, H) + H)] . \quad (9)$$

Die Funktion $\tilde{\mathcal{G}}(T, H) \leq 0$ beschreibt also das Minimum von \mathcal{G} . Damit können wir das Integral (4) schreiben als

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} e^{-\beta\tilde{\mathcal{G}}(H,T)} \int dh e^{-\beta(\mathcal{G}(h,T,H) - \tilde{\mathcal{G}}(H,T))} \quad (10)$$

Die Differenz $\mathcal{G}(h, T, H) - \tilde{\mathcal{G}}(H, T)$ ist in jedem Fall positiv und linear in N . Für große $N \gg 1$ fällt deshalb der Integrand stark exponentiell ab und das Integral kann durch den Beitrag aus der Umgebung des Minimums h_0 genähert werden. Diese Näherung nennt man Sattelpunktmethode und die in (b) besprochene Gleichung die Sattelpunktgleichung. Für $N \rightarrow \infty$ wird diese Integration exakt. Weil die Sattelpunktgleichung mit der Selbstkonsistenzgleichung der Molekularfeldtheorie identisch ist folgt daraus, dass auch die Molekularfeldtheorie in diesem Limes exakt ist.

Für die Integration in der Umgebung von h_0 schreiben wir $h = h_0 + \delta h$ und entwickeln den Exponenten in δh :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(h, T, H) - \tilde{\mathcal{G}}(H, T) &\approx \frac{N\delta h^2}{2J} + \frac{N h_0 \delta h}{J} - N \delta h \tanh[\beta(h_0 + H)] - \frac{N\beta^2 \delta h^2}{2} (1 - \tanh^2[\beta(h_0 + H)]) \\ &= \frac{N(J + \beta(h_0^2 - J^2))}{2J^2} \delta h^2 . \quad (11) \end{aligned}$$

Wir haben hier die Sattelpunktgleichung (6) benutzt um \tanh zu ersetzen, die linearen Terme in δh kürzen sich (wie erwartet, da wir um das Minimum entwickeln). Wir sehen hier am Vorfaktor N explizit, dass die Fluktuationen δh für $N \gg 1$ exponentiell unterdrückt sind.

Die verbleibende Integration entspricht einem Gaußschen Integral, aus (10) erhalten wir

$$\begin{aligned}
Z &= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} e^{-\beta\tilde{G}(H,T)} \int d\delta h e^{-\frac{\beta N(J+h_0^2\beta-J^2\beta)}{2J^2}\delta h^2} \\
&= \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} \frac{J\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\beta N(J+\beta(h_0^2-J^2))}} e^{-\beta\tilde{G}(H,T)} \\
&= \frac{1}{\sqrt{1+\frac{\beta}{J}(h_0^2-J^2)}} e^{-\beta\tilde{G}(H,T)} \tag{12}
\end{aligned}$$

- (d) Die freie Enthalpie bzw. Gibbs-Energie erhalten wir aus $G(H,T) = -k_B T \ln Z$. Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ berücksichtigen wir nur Beiträge $\propto N$, der Vorfaktor in (12) ist also nicht relevant und wir finden $G(H,T) = \tilde{G}(H,T)$. Mit der Sattelpunktgleichung (6) und der Identität $\cosh x = 1/\sqrt{1-\tanh^2 x}$ können wir $G(H,T)$ umformen:

$$\begin{aligned}
G(T,H) &= \tilde{G}(T,H) = \frac{N h_0^2(T,H)}{2J} - N k_B T \ln [2 \cosh \beta(h_0(T,H) + H)] \\
&= \frac{N h_0^2}{2J} + \frac{N k_B T}{2} \ln \left(1 - \frac{h_0^2}{J^2} \right) - N k_B T \ln 2 . \tag{13}
\end{aligned}$$

Wir ersetzen jetzt h_0 mit der Magnetisierung pro Spin $m(H,T) = \frac{h_0(H,T)}{J}$ (man kann mit $m = -\frac{\partial G(H,T)}{N \partial H}$ prüfen, dass m tatsächlich die Magnetisierung pro Spin ist):

$$G(T,H) = \frac{N J m^2(T,H)}{2} + \frac{N k_B T}{2} \ln (1 - m^2(T,H)) - N k_B T \ln 2 . \tag{14}$$

Jetzt müssen wir nur noch den Logarithmus für kleine m entwickeln und erhalten die gesuchte Form

$$\frac{G(T,H)}{N} \approx \frac{k_B(T_c - T)}{2} m^2(T,H) + b m^4(T,H) - k_B T \log 2 , \tag{15}$$

mit $k_B T_c = J$ und $b = -\frac{k_B T}{4}$.

Ein paar Worte zum Ergebnis (15): das ist die freie Enthalpie (Gibbs-Energie) für kleine Magnetisierungen (die echte physikalische freie Enthalpie, kein Landau-Funktional!). Im Limes hoher Temperaturen, $k_B T \gg H, J$, verschwindet h_0 und damit auch die Magnetisierung, es bleibt nur der $\log 2$ -Term der unabhängigen Spins. Gl. (15) gibt an, wie sich die freie Enthalpie verhält solange die Magnetisierung klein ist, bzw. solange der Beitrag der anderen Spins zum effektiven Feld h_0 klein ist im Vergleich zur Stärke der Wechselwirkung, $h_0 \ll J$.

3. Cluster-Entwicklung des 2D-Ising-Modells:

2D-Ising-Modell aus $N \gg 1$ Spins ohne äußeres Magnetfeld auf einem Quadratgitter (Koordinationszahl $z = 4$) mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j . \quad (16)$$

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

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} (\cosh[\beta J \sigma_i \sigma_j] + \sinh[\beta J \sigma_i \sigma_j]) \end{aligned} \quad (17)$$

Wenn man sich die Reihenentwicklungen von \cosh und \sinh anschaut, sieht man, dass in \cosh nur gerade Terme $(\sigma_i \sigma_j)^{2n}$ und in \sinh nur ungerade Terme $(\sigma_i \sigma_j)^{2n+1}$ auftreten. Da $\sigma_i = \pm 1$ ist $(\sigma_i \sigma_j)^{2n} = 1$ und $(\sigma_i \sigma_j)^{2n+1} = \sigma_i \sigma_j$, was uns erlaubt den Faktor $\sigma_i \sigma_j$ aus den Argumenten von \cosh und \sinh rauszuziehen. Damit erhalten wir

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} (\cosh[\beta J] + \sigma_i \sigma_j \sinh[\beta J]) = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} \cosh[\beta J] (1 + \sigma_i \sigma_j \tanh[\beta J]) . \quad (18)$$

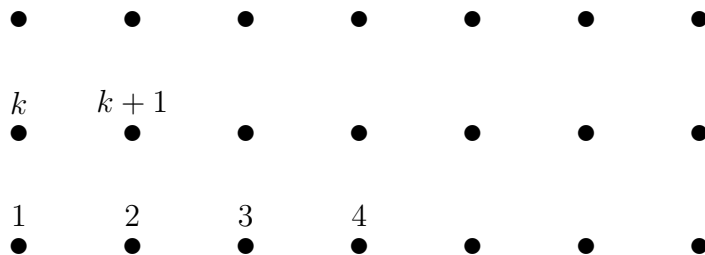
Der \cosh -Faktor steht noch unter dem Produkt, hängt aber nicht mehr von den σ 's ab. Wir können deshalb das Teilprodukt über \cosh ausführen, was gerade zu \cosh^P führt, wobei P gerade die Anzahl der Nächste-Nachbar-Paare ist über die multipliziert werden muss. Wir erhalten damit die gesuchte Form

$$Z = (\cosh(\beta J))^P \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(\beta J)] . \quad (19)$$

Für $N \gg 1$ kann man sich berlegen, was P ist: abgesehen von Randeffekten hat jeder der N Spins $z = 4$ Nachbarn, kommt also in 4 Paaren vor; in jedem Paar sind aber 2 Spins; damit folgt $P = \frac{zN}{2} = 2N$.

(b) Schauen wir uns das Produkt über die Nächste-Nachbar-Paare anhand eines Ausschnitts des 2D-Gitters genauer an:

$$\begin{aligned} \prod_{\langle ij \rangle} [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(\beta J)] &= [1 + \sigma_1 \sigma_2 \tanh(\beta J)] [1 + \sigma_2 \sigma_3 \tanh(\beta J)] [1 + \sigma_3 \sigma_4 \tanh \beta J] \dots \\ &\quad \times [1 + \sigma_1 \sigma_k \tanh(\beta J)] [1 + \sigma_2 \sigma_{k+1} \tanh(\beta J)] \dots \\ &\quad \times [1 + \sigma_k \sigma_{k+1} \tanh(\beta J)] \dots \end{aligned} \quad (20)$$



Es gibt also für jedes Nchste-Nachbar-Paar einen linearen tanh-Term, für jedes Produkt aus zwei Nchste-Nachbar-Paaren einen tanh²-Term usw., also

$$Z = (\cosh(\beta J))^P \sum_{\{\sigma\}} [1 + \tanh(\beta J) (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \dots) + \tanh^2(\beta J) (\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_3 + \dots) + \tanh^3(\beta J) (\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_3 \sigma_4 + \dots) + \dots] . \quad (21)$$

Jeden einzelnen dieser Beitrge kann man als Cluster bezeichnen, ein Nchste-Nachbar-Paar ist dann ein 2-Spin-Cluster, und z.B. $\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_3$ ein 3-Spin-Cluster. Deshalb wird (21) als Cluster-Entwicklung bezeichnet.

Wegen $\sum_{\sigma_i}^{\pm 1} \sigma_i = 0$ tragen nur Terme in (21) zur Summe bei, in denen alle σ 's quadratisch auftreten. Das sind aber gerade die geschlossenen Cluster aus min. 4 Spins. Im obigen Beispiel gibt es z. B. einen Beitrag aus einem geschlossenen 4-Spin-Cluster

$$\sum_{\{\sigma\}} \tanh^4(\beta J) \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_{k+1} \sigma_{k+1} \sigma_k \sigma_k \sigma_1 = \sum_{\{\sigma\}} \tanh^4(\beta J) . \quad (22)$$

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

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^P \sum_{\{\sigma\}} \left[1 + C_4 \tanh^4 \frac{J}{k_B T} + C_6 \tanh^6 \frac{J}{k_B T} + \dots \right] . \quad (23)$$

(c) Wärmekapazität $c_V = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$:

Für $k_B T \gg J$ ist $\tanh J/(k_B T) \gg 1$, es reicht deshalb aus nur den Term der geschlossenen 4-Spin-Cluster mitzunehmen. Fr $N \gg 1$ ist wie gehabt $P = 2N$, und man kann sich analog dazu überlegen, dass $C_4 = N$ (was wäre denn C_6 ?). Die Zustandssumme ist also

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{2N} \sum_{\{\sigma\}} \left[1 + N \tanh^4 \frac{J}{k_B T} \right] \quad (24)$$

$$= 2^N \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{2N} \left[1 + N \tanh^4 \frac{J}{k_B T} \right] . \quad (25)$$

Die freie Energie:

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \ln Z \\ &= -N k_B T \ln 2 - 2N k_B T \ln \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right) - k_B T \ln \left(1 + N \tanh^4 \frac{J}{k_B T} \right) \end{aligned} \quad (26)$$

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

$$F = \dots \approx -N k_B T \ln 2 - N k_B T \left(\frac{J}{k_B T} \right)^2 - \frac{5N k_B T}{6} \left(\frac{J}{k_B T} \right)^4 \quad (27)$$

Damit folgt für die Wärmekapazität

$$c_V \approx 2Nk_B \left(\frac{J}{k_B T} \right)^2 + 10Nk_B \left(\frac{J}{k_B T} \right)^4 . \quad (28)$$