Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie
der Kondensierten Materie

Übungen zur Theoretischen Physik Fb SS 18

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny

Blatt 5
Lösungsvorschlag

1. Landau-Funktional des Ising-Modells

Ising-Modell aus N Spins ($\sigma_i = \pm 1$) auf einem 3-dimensionalen Gitter mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung ($J_{\langle ij \rangle} = J$):

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j . \tag{1}$$

Die Wechselwirkungskonstanten J_{ij} können in Form einer Matrix $\hat{J}$ geschrieben werden, die Matrix $\hat{J}$ sei invertierbar und $\det \hat{J} > 0$.

(a) Die Mikrozustände sind $\{\sigma\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N\}$, die Zustandssumme ist

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j} . \tag{2}$$

Die Summe über i, j kann über alle Spins laufen, wenn man definiert dass $J_{ij} = 0$ falls i und j kein Nächste-Nachbar-Paar sind. Die Information steckt dann in der Matrix $\hat{J}$.

Die Summen über die Mikrozustände $\sigma_i = \pm 1$ können wegen der Spin-Spin-Wechselwirkungsterme nicht direkt ausgeführt werden. Wir benutzen die angegebene Hubbard-Stratonovich-Transformation um die Spin-Spin-Wechselwirkungsterme zu entkoppeln, allerdings auf Kosten kontinuierlicher Felder x_i. Die Summen über die Mikrozustnde $\sigma_i = \pm 1$ können dann ausgeführt werden, jeder Spin i gibt einen Faktor $\sum_{\sigma_i}^{\pm} e^{x_i \sigma_i} = 2 \cosh x_i$ (entspricht der Zustandssumme eines einzelnen Spins in einem externen Feld x_i):

$$\begin{aligned}
Z &= \frac{1}{\sqrt{(4\pi\beta)^N \det \hat{J}}} \sum_{\{\sigma\}} \int \prod_i dx_i e^{-\frac{1}{4\beta} \sum_{i,j} x_i \left(\hat{J}^{-1}\right)_{ij} x_j + \sum_i x_i \sigma_i} \\
&= \frac{2^N}{\sqrt{(4\pi\beta)^N \det \hat{J}}} \int \left(\prod_i dx_i \right) e^{-\frac{1}{4\beta} \sum_{i,j} x_i \left(\hat{J}^{-1}\right)_{ij} x_j} \left(\prod_i \cosh x_i \right) \\
&= \frac{2^N}{\sqrt{(4\pi\beta)^N \det \hat{J}}} \int \left(\prod_i dx_i \right) e^{-\frac{1}{4\beta} \sum_{i,j} x_i \left(\hat{J}^{-1}\right)_{ij} x_j + \sum_i \log\cosh x_i} .
\end{aligned} \tag{3}$$

Wir führen neue Variablen φ_i ein,

$$\varphi_i = \frac{1}{\beta\sqrt{2}} \sum_j \left(\hat{J}^{-1}\right)_{ij} x_j , \qquad x_i = \beta\sqrt{2} \sum_j \hat{J}_{ij} \varphi_j , \tag{4}$$

und entwickeln den $\log\cosh$-Term im Exponenten von Z bis zur vierten Ordnung in J_{ij}, so dass wir die quadratischen φ-Terme zusammenfassen können:

$$\begin{aligned}
\sum_i \log\cosh x_i &= \sum_i \log\cosh\left(\beta\sqrt{2}\sum_j J_{ij}\varphi_j\right) \\
&= \frac{2\beta^2}{2}\sum_i\left(\sum_j J_{ij}\varphi_j\right)^2 - \frac{4\beta^4}{12}\sum_i\left(\sum_j J_{ij}\varphi_j\right)^4 \\
&= \beta^2\sum_{i,j,l} J_{il}\varphi_l J_{ij}\varphi_j - \frac{\beta^4}{3}\sum_i\sum_{j,l,m,n} J_{ij}J_{il}J_{im}J_{in}\varphi_j\varphi_l\varphi_m\varphi_n \\
&= \beta^2\sum_{i,j}\varphi_i\left(\sum_l J_{li}J_{lj}\right)\varphi_j - \frac{\beta^4}{3}\sum_{i,j,l,m,n} J_{ij}J_{il}J_{im}J_{in}\varphi_j\varphi_l\varphi_m\varphi_n\ . \qquad (5)
\end{aligned}$$

Damit wird (3) in den neuen Variablen φ_i zu (beachte $J_{li} = J_{il}$)

$$\begin{aligned}
Z = \frac{2^{\frac{3N}{2}}\sqrt{\beta^N \det \hat{J}}}{\sqrt{(4\pi)^N}} \int \prod_i d\varphi_i\ e^{-\frac{\beta}{2}\sum_{i,j}\varphi_i\left(J_{ij}-2\beta\sum_l J_{il}J_{lj}\right)\varphi_j} \\
\times e^{-\frac{\beta^4}{3}\sum_{i,j,l,m,n} J_{ij}J_{il}J_{im}J_{in}\varphi_j\varphi_l\varphi_m\varphi_n}\ . \qquad (6)
\end{aligned}$$

Bei der Transformation zu den neuen Variablen φ kommt ein Faktor $(\sqrt{2}\beta)^N \det \hat{J}$ aus der Jacobi-Determinante.

(b) Die diskrete Fourier-Transformation ist

$$\varphi_i = \varphi_{\boldsymbol{r}_i} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\varphi_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\ , \qquad J_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}} J_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)} \qquad (7)$$

und hat die Eigenschaft $\sum_i e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}_i} = N\delta_{\boldsymbol{k}}$. Es gibt N mögliche Werte für $\boldsymbol{k}$, d.h. es ist auch $\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}_i} = N\delta_{\boldsymbol{r}_i}$. Der erste quadratische Term im Exponenten von (6) transformiert wie folgt:

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j}\varphi_i J_{ij}\varphi_j &= \frac{1}{N^3}\sum_{i,j}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\boldsymbol{k}'}\varphi_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}_i} J_{\boldsymbol{q}} e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}\varphi_{\boldsymbol{k}'} e^{i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}_j} \\
&= \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\boldsymbol{k}'}\delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}\delta_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}}\varphi_{\boldsymbol{k}} J_{\boldsymbol{q}}\varphi_{\boldsymbol{k}'} = \frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\varphi_{\boldsymbol{k}} J_{\boldsymbol{k}}\varphi_{-\boldsymbol{k}} \qquad (8)
\end{aligned}$$

Wegen $J_{ij} = J_{ji}$ ist auch $J_{-\boldsymbol{q}} = J_{\boldsymbol{q}}$, was hier benutzt wurde. Analog folgt fr den anderen quadratischen Term

$$\sum_{i,j}\varphi_i\left(-2\beta\sum_l J_{il}J_{lj}\right)\varphi_j = -\frac{2\beta}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\varphi_{\boldsymbol{k}} J_{\boldsymbol{k}}^2\varphi_{-\boldsymbol{k}} \qquad (9)$$

und für den φ^4-Term

$$\begin{aligned}
&-\frac{\beta^4}{3}\sum_{i,j,l,m,n} J_{ij}J_{il}J_{im}J_{in}\varphi_j\varphi_l\varphi_m\varphi_n \\
&\qquad = -\frac{\beta^4}{3N}\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3} J_{\boldsymbol{k}_1}J_{\boldsymbol{k}_2}J_{\boldsymbol{k}_3}J_{-\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3}\varphi_{\boldsymbol{k}_1}\varphi_{\boldsymbol{k}_2}\varphi_{\boldsymbol{k}_3}\varphi_{-\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3}\ . \qquad (10)
\end{aligned}$$

Den Exponenten knnen wir zu einem Landau-Funktional $F[\varphi_{\boldsymbol{k}}]$ der Variablen (Felder) $\varphi_{\boldsymbol{k}}$ zusammenfassen, dann ist

$$Z = \frac{(2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\beta^N \det \hat{J}}}{N^N} \int \prod_{\boldsymbol{k}} d\varphi_{\boldsymbol{k}} e^{-\beta F[\varphi]} \tag{11}$$

mit

$$\begin{aligned} F[\varphi_{\boldsymbol{k}}] = \frac{1}{2N} \sum_{\boldsymbol{k}} \varphi_{\boldsymbol{k}} \left(J_{\boldsymbol{k}} - 2\beta J_{\boldsymbol{k}}^2\right) \varphi_{-\boldsymbol{k}} \\ + \frac{\beta^3}{3N} \sum_{\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{k}_3} J_{\boldsymbol{k}_1} J_{\boldsymbol{k}_2} J_{\boldsymbol{k}_3} J_{-\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_3} \varphi_{\boldsymbol{k}_1} \varphi_{\boldsymbol{k}_2} \varphi_{\boldsymbol{k}_3} \varphi_{-\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_3} \end{aligned} \tag{12}$$

(c) Limes großer Wellenlángen, $k_x, k_y, k_z \ll 1/\bar{a}$: Die Wechselwirkung im Fourier-Raum ist

$$J_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{r}_{ij}} J_{ij}\, e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}_{ij}}. \tag{13}$$

Weil J_{ij} nur fr Nächste-Nachbar-Paare von Null verschieden sind, tragen nur die Werte $|\boldsymbol{r}_{ij}| = \bar{a}$ ($\bar{a}$ =Gitterkonstante) zur Summe bei, also

$$\begin{aligned} J_{\boldsymbol{k}} = J\left(e^{-ik_x\bar{a}} + e^{ik_x\bar{a}} + e^{-ik_y\bar{a}} + e^{ik_y\bar{a}} + e^{-ik_z\bar{a}} + e^{ik_z\bar{a}}\right) \\ = 2J\left(\cos(k_x\bar{a}) + \cos(k_y\bar{a}) + \cos(k_z\bar{a})\right). \end{aligned} \tag{14}$$

Jetzt können wir den Limes großer Wellenlängen verwenden um $\cos x = 1 - x^2/2$ zu entwickeln und erhalten das gesuchte Ergebnis

$$J_{\boldsymbol{k}} \approx 2J\left(3 - \frac{\bar{a}^2\boldsymbol{k}^2}{2}\right) = J_0\left(1 - \frac{\bar{a}^2}{6}\boldsymbol{k}^2\right), \tag{15}$$

wobei $J_0 = 6J$. Der Wechselwirkungsterm wird damit vereinfacht zu

$$J_{\boldsymbol{k}_1} J_{\boldsymbol{k}_2} J_{\boldsymbol{k}_3} J_{-\boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_2 - \boldsymbol{k}_3} = (6J)^4 = J_0^4. \tag{16}$$

(d) Wir verwenden die Entwicklung (15) im quadratischen Term in $F[\varphi]$ und vernachlässigen den $(\boldsymbol{k}\bar{a})^4$-Term (große Wellenlängen)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2N} \sum_{\boldsymbol{k}} \varphi_{\boldsymbol{k}} \left(J_{\boldsymbol{k}} - 2\beta J_{\boldsymbol{k}}^2\right) \varphi_{-\boldsymbol{k}} &= \frac{J_0}{2N} \sum_{\boldsymbol{k}} \varphi_{\boldsymbol{k}} \left[1 - \frac{\bar{a}^2}{6}\boldsymbol{k}^2 - 2\beta J_0 \left(1 - \frac{\bar{a}^2}{6}\boldsymbol{k}^2\right)^2\right] \varphi_{-\boldsymbol{k}} \\ &= \frac{J_0}{2N} \sum_{\boldsymbol{k}} \varphi_{\boldsymbol{k}} \left[(1 - 2\beta J_0) + \frac{\bar{a}^2}{6}\left(4\beta J_0 - 1\right)\boldsymbol{k}^2\right] \varphi_{-\boldsymbol{k}} \end{aligned} \tag{17}$$

Im Limes $|\boldsymbol{k}| \ll \bar{a}$ liegen die $\boldsymbol{k}$ Werte dicht und wir können die Summe als Integral schreiben ($\sum_{\boldsymbol{k}} = V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$). Das Ergebnis ist

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2N} \sum_{\boldsymbol{k}} \varphi_{\boldsymbol{k}} \left(J_{\boldsymbol{k}} - 2\beta J_{\boldsymbol{k}}^2\right) \varphi_{-\boldsymbol{k}} \\ &\quad = \frac{J_0 V}{2N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \varphi_{\boldsymbol{k}} \left[(1 - 2\beta J_0) + \frac{\bar{a}^2}{6}\left(4\beta J_0 - 1\right)\boldsymbol{k}^2\right] \varphi_{-\boldsymbol{k}} \\ &\quad = \frac{J_0 V}{2N} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \varphi_{\boldsymbol{k}} \left[a + \xi_0^2 \boldsymbol{k}^2\right] \varphi_{-\boldsymbol{k}} \end{aligned} \tag{18}$$

Wir haben hier schonmal $a = \frac{T-T_c}{T}$ und ξ_0 eingeführt.
Wir müssen jetzt noch mit der kontinuierlichen Fourier-Transformation

$$\varphi_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{V}\int d^3r\varphi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{kr}}$$

zurück in den Ortsraum transformieren. Den $\boldsymbol{k}^2$-Term können wir als Ableitung schreiben:

$$\begin{aligned}
&\frac{J_0}{2NV}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int d^3r\int d^3r'\varphi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{kr}}\left[a+\xi_0^2\boldsymbol{k}^2\right]\varphi(\boldsymbol{r}')e^{i\boldsymbol{kr}'}\\
&\qquad=\frac{J_0}{2NV}\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int d^3r\int d^3r'\varphi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{kr}}\left[a-\xi_0^2\nabla_{\boldsymbol{r}'}^2\right]\varphi(\boldsymbol{r}')e^{i\boldsymbol{kr}'}\\
&\qquad=\frac{J_0}{2NV}\int d^3r\varphi(\boldsymbol{r})\left[a-\xi_0^2\nabla_{\boldsymbol{r}}^2\right]\varphi(\boldsymbol{r})\\
&\qquad=\frac{J_0}{2NV}\int d^3r\left(a\varphi^2(\boldsymbol{r})+\xi_0^2(\nabla\varphi(\boldsymbol{r}))^2-\xi_0^2\nabla^2\varphi^2(\boldsymbol{r})\right)\\
&\qquad=\frac{J_0}{2NV}\int d^3r\left(a\varphi^2(\boldsymbol{r})+\xi_0^2(\nabla\varphi(\boldsymbol{r}))^2\right)
\end{aligned}\tag{19}$$

Der Term $\int d^3r\nabla^2\varphi^2(\boldsymbol{r})$ ist eine totale Ableitung und deshalb ein Randterm. Mit der Annahme, dass die Felder $\varphi(\boldsymbol{r})$ im Unendlichen verschwindet, verschwindet der Randterm.
Der φ^4-Term im Ortsraum ist

$$\begin{aligned}
&\frac{\beta^3}{3N}\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3}J_{\boldsymbol{k}_1}J_{\boldsymbol{k}_2}J_{\boldsymbol{k}_3}J_{-\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3}\varphi_{\boldsymbol{k}_1}\varphi_{\boldsymbol{k}_2}\varphi_{\boldsymbol{k}_3}\varphi_{-\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3}\\
&\qquad=\frac{\beta^3J_0^4V^3}{3N}\int\frac{d^3k_1d^3k_2d^3k_3}{(2\pi)^9}\varphi_{\boldsymbol{k}_1}\varphi_{\boldsymbol{k}_2}\varphi_{\boldsymbol{k}_3}\varphi_{-\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_3}\\
&\qquad=\frac{\beta^3J_0^4}{3NV}\int d^3r\varphi^4(\boldsymbol{r})
\end{aligned}\tag{20}$$

Wir vergleichen die Terme (18) und (20) mit

$$F[\varphi]=\frac{g_0}{2}\int d^3r\left(a\varphi^2(\boldsymbol{r})+\xi_0^2(\nabla\varphi(\boldsymbol{r}))^2+\frac{b}{2}\varphi^4(\boldsymbol{r})\right)\ . \tag{21}$$

und finden ($a = \frac{T-T_c}{T}$ vorgegeben)

$$g_0=\frac{J_0}{NV}\ ,\qquad T_c=\frac{2J_0}{k_B}\ ,\qquad \xi_0=\frac{\bar{a}\sqrt{4\beta J_0-1}}{\sqrt{6}}\ ,\qquad b=\frac{2\beta^3J_0^3}{3}\ . \tag{22}$$

In der Umgebung von T_c ist $\xi_0 = \frac{\bar{a}}{\sqrt{6}}$ und $b = 1/12$.
Gl. (21) ist das Landau-Funktional des Ising-Modells (1) bei großen Wellenlngen (groe Entfernungen). Bei $T = T_c$ wechselt a das Vorzeichen und es findet ein Phasenübergang statt.