

Moderne Theoretische Physik IIIb (Theorie Fb) Sommersemester 2019Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Dr. Stefan Rex**Lösungen zu Blatt 2**
Besprechung: 10.05.2019**1. Eindimensionales Ising-Modell:** (10+15+15=40 Punkte)

Betrachten Sie ein eindimensionales Ising-Modell (wobei hier σ_1 und σ_N nicht durch J verbunden sein sollen):

$$H = -\frac{J}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \frac{\gamma}{2} B \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = 2s_i^z = \pm 1, \quad (1)$$

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

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

$$\chi \equiv \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\gamma^2}{4k_B T} \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle^2 \right]. \quad (2)$$

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

- (b) Mit Hilfe der Transfermatrixmethode bestimmen Sie für $N \rightarrow \infty$ die Korrelationsfunktion $\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2$ und die Korrelationslänge $\xi(B)$ für das 1D-Ising-Modell im endlichen Magnetfeld $B > 0$.
- (c) Betrachten Sie das Ising-Modell (1) aus $N \gg 1$ Spins bei $B = 0$. 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.

$$\sigma_i = \begin{cases} 1, & i \leq k, \\ -1 & i > k, \end{cases} \quad (3)$$

wobei $1 \leq k \leq N - 1$.

Finden Sie die Anzahl der Zustände mit m Domänenwänden. Geben Sie die Zustandssumme des Systems als eine Summe über die Anzahl der Domänenwände an. 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 .

- (d) **10 Bonuspunkte.** 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 1D-Ising-Modell im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$.

Lösung:

- (a) Aus der kanonischen Zustandssumme Z berechnet sich die magnetische Suszeptibilität als

$$\chi = k_B T \frac{\partial}{\partial B} \left(\frac{\partial}{\partial B} \ln(Z) \right) = k_B T \left[\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial B} \right)^2 \right].$$

Bezeichnen wir mit σ die Menge aller Konfigurationen der N Spins, so erhalten wir die kanonische Zustandssumme aus dem angegebenen Hamiltonian durch

$$Z = \sum_{\sigma} e^{\beta \frac{J}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta \frac{\gamma}{2} B \sum_i \sigma_i}.$$

Hieraus berechnen wir

$$\frac{\partial Z}{\partial B} = \frac{\beta \gamma}{2} \sum_{\sigma} \left(\sum_i \sigma_i \right) e^{\beta \frac{J}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta \frac{\gamma}{2} B \sum_i \sigma_i}$$

und

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} = \frac{\beta^2 \gamma^2}{4} \sum_{\sigma} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 e^{\beta \frac{J}{4} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta \frac{\gamma}{2} B \sum_i \sigma_i}.$$

Es gilt also

$$\frac{2}{\beta \gamma} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle, \quad \frac{4}{\beta^2 \gamma^2} \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} = \left\langle \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j \right\rangle.$$

Hieraus folgt die angegebene Relation.

In der Vorlesung wurde für $B = 0$

$$\chi(T, B = 0, N \gg 1) = N \frac{\gamma^2}{4k_B T} \exp\left(\frac{2J}{4k_B T}\right), \quad \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \left(\tanh \frac{J}{4k_B T} \right)^{|j-i|}$$

hergeleitet. Im Falle $B = 0$ ergibt sich aus der hier hergeleiteten Relation

$$\chi = \frac{\gamma^2}{4k_B T} \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle^2 \right] = \frac{\gamma^2}{4k_B T} \left[\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \right],$$

da die Spins bei $B = 0$ ja gerade keine Vorzugsrichtung besitzen. Verwenden wir nun das Resultat für $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ aus der Vorlesung und schreiben $g = J/(4k_B T)$, ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{4k_B T}{\gamma^2} \chi &= \sum_{i=0}^N \left\{ \sum_{k=0}^{i-1} (\tanh g)^k + \sum_{k=1}^{N-i} (\tanh g)^k \right\} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^N [1 - (\tanh g)^i - (\tanh g)^{N-i+1} + \tanh g]}{1 - \tanh g}, \end{aligned}$$

wobei wir die Partialsummen der geometrischen Reihe verwenden. Weiteres Vereinfachen ergibt

$$\chi = \frac{\gamma^2}{4k_B T} e^{2g} \{ N + \sinh(2g) [(\tanh g)^N - 1] \},$$

was für grosse N gerade zur in der Vorlesung hergeleiteten Suszeptibilität führt, also die gewünschte Relation erfüllt.

- (b) Im Unterschied zur Vorlesung ist hier zu beachten, dass die Enden der Kette nicht verknüpft sind, wir also auch keine periodischen Randbedingungen annehmen. Wir erhalten für die Zustandssumme

$$Z = \sum_{\sigma} e^{\beta \frac{\gamma}{2} B \sigma_1} e^{\beta \frac{J}{4} \sigma_1 \sigma_2} e^{\beta \frac{\gamma}{2} B \sigma_2} \dots e^{\beta \frac{J}{4} \sigma_{N-1} \sigma_N} e^{\beta \frac{\gamma}{2} B \sigma_N}.$$

Wir verwenden wieder die Transfermatrixmethode und definieren die 2×2 Matrix T durch die Einträge

$$T_{\sigma\sigma'} = e^{\frac{h}{2}(\sigma+\sigma')} e^{g\sigma\sigma'}, \quad h = \beta B \frac{\gamma}{2}, \quad g = \beta \frac{J}{4},$$

also

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

Dann können wir die Zustandssumme umschreiben als

$$Z = \sum_{\sigma} e^{\frac{h}{2}\sigma_1} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_N}.$$

Hier zeigt sich der Unterschied zu den periodischen Randbedingungen! Während die Summe über alle inneren σ gerade einem Matrixprodukt entspricht, muss die Summe über σ_1 und σ_N explizit ausgeführt werden.

Zunächst stellen wir jedoch fest, dass T reell symmetrisch ist, und somit unitär equivalent zu einer Matrix in Diagonalgestalt mit reellen Eigenwerten. Diagonalisieren ergibt

$$T = UDU^{-1}, \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad U = (l_1 \quad l_2)$$

mit

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= e^g \cosh h \pm \sqrt{e^{2g} \sinh^2 h + e^{-2g}}, \\ l_1 = |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1 + e^{2g}(\lambda_1 - e^{g-h})^2}} \begin{pmatrix} e^g(\lambda_1 - e^{g-h}) \\ 1 \end{pmatrix}, \\ l_2 = |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1 + e^{2g}(\lambda_2 - e^{g-h})^2}} \begin{pmatrix} e^g(\lambda_2 - e^{g-h}) \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Somit erhalten wir

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_1} (UD^{N-1}U^{-1})_{\sigma_1\sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_N} = \sum_{\sigma_1, \sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_1} (\lambda_1^{N-1} l_1 l_1^T + \lambda_2^{N-1} l_2 l_2^T)_{\sigma_1\sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_N}. \quad (4)$$

Im thermodynamischen Limes $N \gg 1$ gilt $\lambda_1^N \gg \lambda_2^N$, im Nenner ist also nur der Term mit $l = 1$ relevant:

$$Z \rightarrow \lambda_1^{N-1} \sum_{\sigma_1, \sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_1} (l_1 l_1^T)_{\sigma_1\sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_N}. \quad (5)$$

Als nächstes fügen wir $\sigma_i \sigma_j$ in die Zustandssumme ein, wobei wir annehmen, dass beide nicht genau am Rand sind und o.B.d.A $j > i$. Wir erhalten also

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} e^{\frac{h}{2}\sigma_1} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} \dots T_{\sigma_{i-1}\sigma_i} \sigma_i T_{\sigma_i\sigma_{i+1}} \dots T_{\sigma_{j-1}\sigma_j} \sigma_j T_{\sigma_j\sigma_{j+1}} \dots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_N} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} e^{\frac{h}{2}\sigma_1} T_{\sigma_1\sigma_i}^{i-1} (\sigma_z T^{j-i})_{\sigma_i\sigma_j} (\sigma_z T^{N-j})_{\sigma_j\sigma_N} e^{\frac{h}{2}\sigma_N} \end{aligned}$$

Diagonalisieren ergibt

$$\begin{aligned}\langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \sigma_i, \sigma_j, \sigma_N} e^{\frac{\hbar}{2} \sigma_1} (UD^{i-1}U^{-1})_{\sigma_1 \sigma_i} (\sigma_z UD^{j-i}U^{-1})_{\sigma_i \sigma_j} (\sigma_z UD^{N-j}U^{-1})_{\sigma_j \sigma_N} e^{\frac{\hbar}{2} \sigma_N} \\ &= \frac{\sum_{l, m, n} \lambda_l^{i-1} \lambda_m^{j-i} \lambda_n^{N-j} \langle l | \sigma_z | m \rangle \langle m | \sigma_z | n \rangle \sum_{\sigma_1, \sigma_N} e^{\frac{\hbar}{2} (\sigma_1 + \sigma_N)} (|l\rangle \langle n|)_{\sigma_1 \sigma_N}}{\sum_l \lambda_l^{N-1} \sum_{\sigma_1, \sigma_N} e^{\frac{\hbar}{2} (\sigma_1 + \sigma_N)} (|l\rangle \langle l|)_{\sigma_1 \sigma_N}}.\end{aligned}$$

Wir erhalten also wieder die aus der Vorlesung bekannten Matrixelemente, aber zusätzlich wieder die selben Randterme. Um Effekte durch die Randbedingungen vernachlässigen zu können, müssen weiterhin sowohl i als auch j mittig zwischen 1 und N liegen, so dass sowohl $i - 1$ als auch $N - j$ gross sind, wohingegen $j - i$ auch beliebig klein sein darf. Unter diesen Voraussetzungen überwiegen im Zähler die Terme mit $l = 1$ und $n = 1$, wir erhalten also

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \xrightarrow[j \propto N, i \propto N]{N \rightarrow \infty} \sum_m |\langle 1 | \sigma_z | m \rangle|^2 \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right)^{j-i}$$

Dieses Ergebnis können wir mit dem Ergebnis aus der Vorlesung für periodische Randbedingungen vergleichen, wo wir gesehen haben, dass

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = \sum_{l=1,2} \sum_{l'=1,2} |\langle l | \sigma_z | l' \rangle|^2 \frac{\lambda_l^{N-n} \lambda_{l'}^n}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sum_{l'} |\langle 1 | \sigma_z | l' \rangle|^2 \left(\frac{\lambda_{l'}}{\lambda_1} \right)^n.$$

Im thermodynamischen Limes sind die genauen Randbedingungen also irrelevant, so lange die Spins im Korrelator nicht zu Nahe am Rand sind. Wir können im Weiteren also mit periodischen Randbedingungen weiterrechnen! Die Matrixelemente berechnen sich hier zu

$$|\langle 1 | \sigma_z | 1 \rangle|^2 = \frac{\sinh^2 h}{\sinh^2 h + e^{-4g}}, \quad |\langle 1 | \sigma_z | 2 \rangle|^2 = \frac{e^{-4g}}{\sinh^2 h + e^{-4g}}.$$

Also gilt im thermodynamischen Limes

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle = \frac{1}{\sinh^2 h + e^{-4g}} \left(\sinh^2 h + \frac{\lambda_2^n}{\lambda_1^n} e^{-4g} \right)$$

Analog überlegt man sich, dass

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_l \lambda_l^N \langle l | \sigma_z | l \rangle,$$

also für $N \gg 1$, in welchem Fall λ_2^N gegen λ_1^N vernachlässigt werden kann

$$\langle \sigma_i \rangle^2 = |\langle 1 | \sigma_z | 1 \rangle|^2$$

und somit insgesamt

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2 = \frac{e^{-4g}}{\sinh^2 h + e^{-4g}} \frac{\lambda_2^n}{\lambda_1^n}$$

und die Korrelationslänge ist bestimmt durch

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2 = e^{-n/\xi} \rightarrow \frac{1}{\xi} = \ln \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)$$

- (c) Eine Kette mit N Spins hat gerade $N-1$ Zwischenräume, in denen die Domänenwände platziert werden können. Da die Reihenfolge der Auswahl egal ist und es keine Mehrfachbelegungen gibt, handelt es sich hier also wieder um einen Binomialkoeffizienten, also gibt es $\binom{N-1}{m}$ Möglichkeiten, die m Wände zu platzieren. Bei verschwindendem magnetischen Feld ist die Energie bei m Wänden gerade

$$E_m = -\frac{J}{4}(N-1-2m),$$

die Zustandssumme ist also

$$Z = \sum_{m=0}^{N-1} \binom{N-1}{m} e^{\frac{\beta J}{4}(N-1-2m)} = \left(2 \cosh \frac{J}{4k_B T}\right)^{N-1}$$

da wir annehmen, dass $\sigma_1 = 1$, hängt das Vorzeichen von σ_N von m ab. Für gerades m , ist $\sigma_N = 1$, für ungerades ist $\sigma_N = -1$. Somit gilt

$$\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle = \frac{1}{Z} e^{\frac{\beta J}{4}(N-1)} \sum_{m=0}^{N-1} \binom{N-1}{m} (-e^{-\beta J/2})^m (1)^{N-1-m}.$$

Dann ergibt sich

$$\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle = \left(\tanh \frac{J}{4k_B T} \right)^{N-1} = e^{-\frac{N-1}{\xi}}$$

Für grosse N erhalten wir also einen exponentiellen Abfall mit

$$\xi = -\frac{1}{\ln \left(\tanh \frac{J}{4k_B T} \right)}$$

Insbesondere gibt es eine Temperatur T_N , unterhalb derer die Korrelationslänge so lang ist, wie die gesamte Kette, nämlich

$$N = -\frac{1}{\ln \left(\tanh \frac{J}{4k_B T_N} \right)} \Leftrightarrow T_N = \frac{J}{4k_B} \operatorname{arctanh} \left(e^{-\frac{1}{N}} \right).$$

Für grosses N konvergiert diese Temperatur gegen Null, es gibt in diesem System also keine langreichweitige Ordnung! Tatsächlich besagt das Mermin-Wagner Theorem, dass es im Allgemeinen keine Phasenübergänge bei endlichen Temperaturen in ein- oder zweidimensionalen Systemen mit kurzreichweitiger Wechselwirkung geben kann.

- (d) **10 Bonuspunkte.**

Wie schon in der vorletzten Teilaufgabe bemerkt, muss für jeden Spin, der im Korrelator auftaucht, eine Pauli-z-Matrix an der passenden Stelle eingefügt werden. Für einen Spin σ_i ist das gerade zwischen $T_{\sigma_{i-1}\sigma_i}$ und $T_{\sigma_i\sigma_{i+1}}$. Da σ_z nicht mit den unitären Matrizen der Diagonalisierung kommutiert, erhalten wir also immer Matrixelemente der Form $\langle l | \sigma_z | m \rangle$. Für den Dreier-Korrelator erhalten wir also

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle = \frac{1}{Z} \operatorname{Tr} \left(\sum_{l,m,n,o} |l\rangle \lambda_l^i \langle l | \sigma_z | m \rangle \lambda_l^{j-i} \langle m | \sigma_z | n \rangle \lambda_n^{k-j} \langle n | \sigma_z | o \rangle \lambda_o^{N-k} \langle o | \right)$$

wobei wir $1 < i < j < k < N$ annehmen. Im Fall $B = 0 \rightarrow h = 0$ vereinfachen sich sowohl die Eigenwerte als auch die Eigenvektoren. Es gilt

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 2 \cosh g, & l_1 &= |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \lambda_2 &= 2 \sinh g, & l_2 &= |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Insbesondere stellen wir fest, dass $\langle 1|\sigma_z|1\rangle = \langle 2|\sigma_z|2\rangle = 0$ und $\langle 1|\sigma_z|2\rangle = \langle 2|\sigma_z|1\rangle = 1$ gilt. Aus der Orthonormalität der Basis und den Eigenschaften der Spur folgt ausserdem, dass hier $o = l$ gelten muss. Wir erhalten also

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle = \frac{1}{Z} \left(\sum_{l,m,n} \lambda_l^i \langle l|\sigma_z|m\rangle \lambda_l^{j-i} \langle m|\sigma_z|n\rangle \lambda_n^{k-j} \langle n|\sigma_z|l\rangle \lambda_l^{N-k} \right).$$

Da nur Summanden beitragen, in denen ausschliesslich nicht-diagonale Matrixelemente auftauchen, sehen wir hier, dass alle Korrelatoren mit einer ungeraden Anzahl an Spins bei $B = 0$ verschwinden.

Analog sehen wir für den Viererkorrelator, wieder unter der Annahme $1 < i < j < k < l < N$:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{l,m} \lambda_l^{N+i-j+k-l} \lambda_m^{j-i+l-k} |\langle l|\sigma_z|m\rangle|^4$$

Im thermodynamischen Limes $N \gg 1$ und unter Berücksichtigung von Z erhalten wir

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \rangle = \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{i-j} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{k-l} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \langle \sigma_k \sigma_l \rangle$$

2. Zweidimensionales Ising-Modell:

(10+15+5=30 Punkte)

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

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (6)$$

(a) Bringen Sie die Zustandssumme auf die Form

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{P(N)} \sum_{\sigma} \prod_{\langle ij \rangle} \left(1 + \sigma_i \sigma_j \tanh \frac{J}{k_B T} \right). \quad (7)$$

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

(b) Überlegen Sie sich, dass man Z aus Gl. (7) wie folgt entwickeln kann:

$$Z = 2^N \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{P(N)} \sum_{m=0}^{\infty} C_{2m}(N) \left(\tanh \frac{J}{k_B T} \right)^{2m} \quad (8)$$

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 $C_6(N)$.

- (c) Betrachten Sie den Grenzfall hoher Temperaturen $k_B T \gg J$ und berechnen Sie die Wärmekapazität c_V bis zur vierten Ordnung in $J/(k_B T)$.
- (d) **15 Bonuspunkte.** Das 2D-Ising-Modell kann auch formuliert werden, indem man Domänen betrachtet (s. Teilaufgabe 1c). Die einfachste Anregung (Spin-Umklapp) kann als kürzest mögliche Domänenwand (der Länge $\ell = 4$) angesehen werden. Nehmen Sie an, dass die Spins am Rand nach oben zeigen. Berechnen Sie die durchschnittliche Anzahl von Spins N_\downarrow , die nach unten zeigen, wobei nur die kürzesten Domänenwände betrachtet werden sollen. Geben Sie eine obere Schranke für den Beitrag der Domänenwände einer beliebigen Länge ℓ zur Zustandssumme an.

Lösung:

- (a) Bezeichnet man mit σ die Menge aller Konfigurationsmöglichkeiten der σ_i , so ist die kanonische Zustandssumme laut Definition

$$Z = \sum_{\sigma} e^{J\beta \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j}.$$

Unter Ausnutzung der Relation

$$e^x = \frac{1}{2}e^x + \frac{1}{2}e^x + \frac{1}{2}e^{-x} - \frac{1}{2}e^{-x} = \cosh(x) + \sinh(x) = \cosh(x)[1 + \tanh(x)]$$

kann dies umformuliert werden zu

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

Da $\sigma_i \sigma_j = \pm 1$, $\cosh(-x) = \cosh(x)$ und $\tanh(-x) = -\tanh(x)$ gilt weiterhin

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

Um den ersten Faktor zu berechnen, findet man die Anzahl der Nächste-Nachbar-Paare. Stellt man sich die N Spins als auf einem Quadratgitter angeordnet vor, hat dies die Grösse $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$. In jeder der \sqrt{N} Reihen gibt es $\sqrt{N} - 1$ Nächste-Nachbar-Paare; gleiches gilt für die Spalten. Somit gibt es insgesamt $2\sqrt{N}(\sqrt{N} - 1) \rightarrow 2N$ Nächste-Nachbar-Paare unter Vernachlässigung von Randtermen und man erhält

$$\left[\prod_{\langle ij \rangle} \cosh(J\beta) \right] = [\cosh(J\beta)]^{P(N)} \rightarrow [\cosh(J\beta)]^{2N}$$

und das Endergebnis

$$Z = [\cosh(J\beta)]^{2N} \sum_{\sigma} \left\{ \prod_{\langle ij \rangle} [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(J\beta)] \right\}.$$

- (b) Zur weiteren Vereinfachung multipliziert man das Produkt aus und sortiert nach Potenzen von \tanh . Man erhält

$$\begin{aligned} \prod_{\langle ij \rangle} [1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(J\beta)] &= 1 + \tanh(J\beta) \left(\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \right) \\ &+ [\tanh(J\beta)]^2 \left(\sum_{\langle ij \rangle, \langle kl \rangle \neq \langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l \right) + \dots \end{aligned}$$

Da am Ende über alle Konfigurationsmöglichkeiten summiert wird, trägt jeder Beitrag, in dem mindestens ein σ_i mit einer ungeraden Potenz auftritt aus (Anti-) Symmetriegründen nicht bei. Terme, in denen ausschliesslich gerade Potenzen auftreten sind gerade die, in welchen geschlossene Schleifen entstehen, welche hier als Cluster bezeichnet werden. Das kleinste solche Cluster besteht gerade aus 4 Kopplungen, die quadratförmig angeordnet sind, das nächst grössere aus 6, im Allgemeinen trägt jede gerade Zahl die grösser als 2 ist bei. Ein Beispiel hierfür ist jeweils in Abbildung 1 zu sehen.

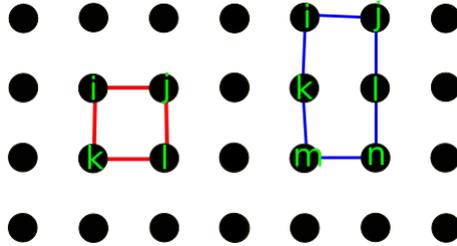


Abbildung 1: Rot: kleinstes geschlossenes Cluster, vier Kopplungen. Blau: nächst grösseres Cluster, sechs Kopplungen

Das rote Cluster entspricht dem Beitrag

$$[\tanh(J\beta)]^4 (\sigma_i\sigma_j)(\sigma_j\sigma_l)(\sigma_l\sigma_k)(\sigma_k\sigma_i)$$

und das blaue dem Beitrag

$$[\tanh(J\beta)]^6 (\sigma_i\sigma_j)(\sigma_j\sigma_l)(\sigma_l\sigma_n)(\sigma_n\sigma_m)(\sigma_m\sigma_k)(\sigma_k\sigma_i)$$

Da auf einem Quadratgitter keine Cluster mit einer ungeraden Anzahl an Kopplungen existieren, tragen nur gerade Potenzen des \tanh zur Zustandssumme bei. Der Beitrag der Terme mit vier Kopplungen ist im Allgemeinen gegeben durch

$$Z_4 = [\cosh(J\beta)]^{2N} \sum_{\sigma} \sum_{\langle ij \rangle, \langle kl \rangle, \langle mn \rangle, \langle op \rangle} \sigma_i\sigma_j\sigma_k\sigma_l\sigma_m\sigma_n\sigma_o\sigma_p [\tanh(J\beta)]^4.$$

Da nur die erwähnten Vierer-Cluster einen endlichen Beitrag leisten, entspricht die innere Summe der Summe über alle solche Vierer-Cluster, deren Anzahl wir mit C_4 notieren. Hierbei gilt $C_4 = (\sqrt{N} - 1)(\sqrt{N} - 1) \rightarrow N$ und

$$Z_4 = [\cosh(J\beta)]^{2N} \sum_{\sigma} C_4 \tanh(J\beta)^4 = 2^N (\cosh(J\beta))^{2N} C_4 [\tanh(J\beta)]^4$$

Analog tragen alle geschlossenen Cluster höherer Ordnung bei, so dass wir insgesamt Gleichung 8 erhalten. Da Sechser-Cluster sowohl auf einer langen, als auch auf einer kurzen Seite stehen können, erhält man für C_6 einen zusätzlichen Faktor zwei, also $C_6 = 2N$ und $C_2 = 0$

- (c) Für hohe Temperaturen $k_B T \gg J$ kann der \tanh um Null entwickelt werden. Da die Taylorreihe mit dem linearen Term beginnt, ist der Summand mit C_6 schon sechster Ordnung in $J/k_B T$ und kann abgeschnitten werden. Wir rechnen also mit

$$Z \approx 2^N \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^{P(N)} \left[1 + C_4 \left(\tanh \frac{J}{k_B T} \right)^4 \right].$$

Weiterhin gilt

$$c_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = T \frac{\partial}{\partial T} \left[k_B \frac{\partial}{\partial T} (T \ln Z) \right] = k_B T \left(2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z + T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \ln Z \right).$$

Da wir am Ende in Potenzen von $J/k_B T$ entwickeln, ändert Ableiten die Ordnung nicht und wir können bereits

$$\ln Z = \ln(2^N) + P(N) \ln \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right) + \ln \left[1 + C_4 \left(\tanh \frac{J}{k_B T} \right)^4 \right]$$

entwickeln, wobei wir $\cosh(x)$, $\ln(1+x)$ und $\tanh(x)$ nähern und erhalten

$$\ln Z \approx \ln(2^N) + P(N) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{J}{k_B T} \right)^2 - \frac{1}{12} \left(\frac{J}{k_B T} \right)^4 \right] + C_4 \left(\frac{J}{k_B T} \right)^4$$

und somit

$$c_V \approx k_B \left[P(N) \left(\frac{J}{k_B T} \right)^2 + 16 \left(C_4 - \frac{P(N)}{12} \right) \left(\frac{J}{k_B T} \right)^4 \right].$$

Da sowohl $P(N)$ als auch C_4 im thermodynamischen Limes proportional zu N sind, sieht man hier insbesondere, dass die Wärmekapazität eine extensive Grösse ist.

(d) **15 Bonuspunkte.**

Spin-Umklapp Zustände zeichnen sich gerade dadurch aus, dass nur einzelne Spins umgeklappt sind. Zeigen alle Spins nach oben, ist die Energie gerade $E = -P(N)J$. Jeder umgeklappte Spin erhöht die Energie um genau $8J$, da er vier nächste Nachbarn hat. Hierbei vernachlässigen wir die Kopplung zwischen mehreren umgeklappten Spins. Für m umgeklappte Spins erhalten wir also die Energie

$$E = -2NJ + 8mJ.$$

Da die Energie nur von der Anzahl der umgeklappten Spins abhängt, bestimmen wir die Anzahl der Mikro-Zustände zu gegebenem m . Da es insgesamt N Spins gibt und die Auswahlreihenfolge egal ist, ist diese Anzahl wieder genau durch den Binomialkoeffizienten $\binom{N}{m}$ gegeben. Wir erhalten also für die Zustandssumme

$$Z = \sum_{m=0}^N \binom{N}{m} e^{\beta(2NJ-8mJ)} = e^{2N\beta J} \sum_{m=0}^N \binom{N}{m} 1^{N-m} [e^{-8\beta J}]^m = e^{2N\beta J} (1 + e^{-8\beta J})^N.$$

Die durchschnittliche Anzahl der umgeklappten Spins ist gerade bestimmt durch $N_\downarrow = \langle m \rangle$

$$N_\downarrow = \frac{1}{Z} \sum_{m=0}^N m \binom{N}{m} e^{\beta(2NJ-8mJ)} = -\frac{e^{2N\beta J}}{8JZ} \frac{\partial}{\partial \beta} (1 + e^{-8\beta J})^N = \frac{N}{1 + \exp(8\beta J)}.$$

Möchte man nun den Beitrag für beliebige Domänenwändlungen abschätzen, stellen wir zunächst fest, dass eine Domäne mit Länge ℓ der Energie $2\ell J$ entspricht. Vernachlässigen wir, dass bestimmte Längen nur bei Startpunkten am Rand realisiert werden können, schätzen wir die Anzahl der Realisierungsmöglichkeiten einer

Domänenwand der Länge ℓ ab, in dem wir sie von einem beliebigen der N möglichen Startpunkte aus aufbauen. Für die erste Domänenwand, gibt es im Inneren genau 4 Möglichkeiten, für jede weitere dagegen nur noch 3, da sie ja wachsen soll. Somit können wir den Beitrag durch Domänenwände der Länge ℓ abschätzen durch

$$\delta Z_\ell \approx 4N3^{\ell-1}e^{-2\ell\beta J}.$$

Für tiefe Temperaturen fällt der Beitrag höherer Domänenwandlängen also monoton ab, weshalb die zuvor berechneten Spin-Flip Prozesse tatsächlich die wichtigsten sind.

3. Ising-Wechselwirkung mit unendlicher Reichweite: (15 + 15 = 30 Punkte)

Betrachten Sie ein Ising-Modell in beliebiger Dimension, in dem jeder Spin $s_i = 1/2$ mit jedem anderen Spin (nicht nur mit seinen nächsten Nachbarn) wechselwirkt:

$$H = J - \frac{J}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sigma_i \sigma_j - \gamma B \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (9)$$

Wichtig ist hierbei, dass die Kopplung J/N mit N^{-1} abnimmt, da die Gesamtenergie extensiv sein muss. Der konstante Term J kompensiert die unphysikalische Selbstwechselwirkung, die für $i = j$ in der Summe auftritt.

- Wie viele Möglichkeiten gibt es, um einen gegebenen Gesamtspin S_{tot} zu erhalten? Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme Z für dieses Modell im Limes $N \gg 1$.
- 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:

- Um die Anzahl der Realisierungsmöglichkeiten zu einem gegebenen $S_{\text{tot}} = \sum_i s_i = \frac{1}{2} \sum_i \sigma_i$ zu bestimmen, stellen wir fest, dass der Gesamtspin $S_{\text{tot}} = -N/2$ dem Minimum entspricht, wo gerade alle Spins nach unten zeigen. Jeder umgeklappte Spin erhöht den Gesamtspin um 1, um den Gesamtspin $S_{\text{tot}} = -N/2 + k$ für $k \in \mathbb{N}$ zu erhalten, müssen also k der N Spins umgeklappt werden. Da die Reihenfolge wieder egal ist und es nur zwei Zustände pro Spin gibt, ist die Anzahl der Realisierungsmöglichkeiten wieder über den Binomialkoeffizienten $\binom{N}{k}$ gegeben.
- Da hier jeder Spin mit jedem wechselwirkt, kann der Hamiltonian umgeschrieben werden zu

$$H = J - \frac{J}{N} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 - \gamma B \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$

Führen wir den Gesamtspin S_{tot} ein, sehen wir, dass die Energie nur vom Gesamtspin, nicht jedoch von der mikroskopischen Realisierung abhängt, also

$$H = J - \frac{4J}{N} S_{\text{tot}}^2 - 2\gamma B S_{\text{tot}}$$

Die kanonische Zustandssumme ist also gerade gegeben durch

$$Z = e^{-\beta J} \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} e^{\beta \frac{4J}{N} (-\frac{N}{2} + k)^2 + 2\beta\gamma B (-\frac{N}{2} + k)}.$$

Aufgrund der komplexeren Abhängigkeit von der Summationsvariablen können wir diesen Ausdruck hier jedoch nicht auf ein Binom zurückführen. Stattdessen verwenden wir hier eine Hubbard-Stratonovich-Transformation, um die quadratische Abhängigkeit durch eine Abhängigkeit von einem Hilfsfeld auszudrücken. Wir schreiben also

$$Z = e^{-\beta J} \sum_{\sigma} e^{\beta \frac{4J}{N} S_{\text{tot}}^2 + 2\beta\gamma B S_{\text{tot}}}$$

Auf den quadratischen Term wenden wir die Transformation an, also

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

Somit können wir die Zustandssumme umschreiben zu

$$Z = e^{-\beta J} \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{-N \frac{\lambda^2}{4\beta J} + 2\lambda S_{\text{tot}} + 2\beta\gamma B S_{\text{tot}}}.$$

Da wir die Spins nun entkoppelt haben, können wir die Spinsumme hier ausführen

$$\sum_{\sigma} e^{2(\lambda + \beta\gamma B) S_{\text{tot}}} = \sum_{\sigma} e^{(\lambda + \beta\gamma B) \sum_{i=0}^N \sigma_i} = \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma} e^{(\lambda + \beta\gamma B) \sigma_i} = (2 \cosh(\lambda + \beta\gamma B))^N$$

Wir erhalten also für die Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta J} \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{-N \frac{\lambda^2}{4\beta J}} [2 \cosh(\lambda + \beta\gamma B)]^N.$$

Den cosh Term drücken wir aus als $(2 \cosh x)^N = e^y \Leftrightarrow y = N \ln(2 \cosh x)$ und erhalten damit

$$Z = e^{-\beta J} \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{-N \left(\frac{\lambda^2}{4\beta J} - \ln(2 \cosh(\lambda + \beta\gamma B)) \right)}$$

Da der Integrand im thermodynamischen Limes exponentiell klein ist, trägt nur das Maximum des Integranden bei, was gerade beim Minimum von

$$f(\lambda) = \frac{\lambda^2}{4\beta J} - \ln[2 \cosh(\lambda + \beta\gamma B)]$$

angenommen wird, das wir hier durch λ_0 bezeichnen. Durch Ableiten der Definition von f erhalten wir folgende Bestimmungsgleichung für λ_0 :

$$\lambda_0 = 2\beta J \tanh(\lambda_0 + \beta\gamma B)$$

und die Zustandssumme in der Sattelpunktnäherung ist dann gerade

$$Z_0 = e^{-\beta J} \sqrt{\frac{N}{4\pi\beta J}} e^{-Nf(\lambda_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(\lambda_0)}}.$$

Aus der Vorlesung kennen wir die Selbstkonsistenzgleichung für $\langle\sigma\rangle$ für die Molekularfeldtheorie:

$$\langle\sigma\rangle = \tanh(\beta\gamma B + z\beta J\langle\sigma\rangle),$$

wobei z die Zahl der nächsten Nachbarn beschreibt. Wir erhalten also für den Fall $z = 2$, eine eindimensionale Kette, die gleiche Selbstkonsistenzgleichung für λ_0 und $2\beta J\langle\sigma\rangle$. Die hier vorgestellte Hubbard-Stratonovich-Transformation wird vor allem im Pfadintegralformalismus häufig angewandt. In diesem Fall hier können wir mit ihr sogar zeigen, dass die mean-field Methode im thermodynamischen Limes exakt ist und das eingeführte Hilfsfeld λ gerade mit Hilfe der Sattelpunktnäherung das passende mean-field liefert, nämlich $\langle\sigma\rangle$