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

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

Lösungen zu 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.

Lösung:

Um die Molekularfeldnäherung im Hamiltonoperator (1) durchzuführen betrachten wir zunächst zwei allgemeine Operatoren $\hat{O}_1$ und $\hat{O}_2$. Sei $\langle ... \rangle$ der Mittelwert eines Operators. Somit gilt für das Produkt aus zwei Operatoren

$$\begin{aligned}\hat{O}_1\hat{O}_2 &= \hat{O}_1 \langle \hat{O}_2 \rangle + \hat{O}_2 \langle \hat{O}_1 \rangle - \langle \hat{O}_1 \rangle \langle \hat{O}_2 \rangle + (\hat{O}_1 - \langle \hat{O}_1 \rangle)(\hat{O}_2 - \langle \hat{O}_2 \rangle) \\ &\approx \hat{O}_1 \langle \hat{O}_2 \rangle + \hat{O}_2 \langle \hat{O}_1 \rangle - \langle \hat{O}_1 \rangle \langle \hat{O}_2 \rangle . \end{aligned} \tag{2}$$

Im letzten Schritt wurde die Abweichung vom Mittelwert in zweiter Ordnung vernachlässt. Dies ist dadurch gerechtfertigt, dass in der Molekularfeldtheorie angenommen wird, dass die Operatoren nur in kleinen Abweichungen um den Mittelwert (Mean-Field) herum Werte annehmen. Für den Hamiltonoperator gilt somit

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \vec{s}_j \approx -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\langle \hat{s}_i \rangle \hat{s}_j + \hat{s}_i \langle \hat{s}_j \rangle - \langle \hat{s}_i \rangle \langle \hat{s}_j \rangle \right) \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(2 \underbrace{\langle \hat{s}_i \rangle}_{=\langle s \rangle} \hat{s}_j - \underbrace{\langle \hat{s}_i \rangle \langle \hat{s}_j \rangle}_{=\langle s \rangle^2} \right) = -J \sum_j \left(z \langle \hat{s} \rangle \hat{s}_j - \frac{z}{2} \langle \hat{s} \rangle^2 \right) \\ &= -\underbrace{Jz\langle \hat{s} \rangle}_{=\hat{B}_{\text{eff}}} \sum_i \hat{s}_i + \underbrace{\frac{NzJ}{2} \langle \hat{s} \rangle^2}_{=E_0} = -\vec{B}_{\text{eff}} \cdot \sum_i \vec{s}_i + E_0 = H_{\text{MF}}. \end{aligned}$$

Die Anzahl nächster Nachbarn ist $z = 6$. In der Zeile zwei wird bei der Summe durch den Faktor 1/2 berücksichtigt, dass die Positionen nicht doppelt gezählt werden. Dies war zuvor in der Summe über nächste Nachbarpaare berücksichtigt worden.

Wir wählen Bezugssystem so, dass das durch spontane Symmetriebrechung entstandene effektive Magnetfeld

$$B_{\text{eff}} = zJ\langle s^z \rangle \tag{3}$$

in z-Richtung zeigt (nachdem also eine Magnetisierung in beliebige Richtung da ist, rotieren wir es in z-Richtung). Somit lautet die Zustandssumme für H_{MF}:

$$Z_{\text{MF}} = \sum_{\{s_i\}} \mathrm{e}^{-\beta H_{\text{MF}}} = \sum_{\{s_i\}} \mathrm{e}^{\beta(-E_0 + B_{\text{eff}} \sum_i s_i^z)} = \mathrm{e}^{-\beta E_0} \prod_{i=1}^{N} \sum_{m=-S}^{S} \mathrm{e}^{\beta B_{\text{eff}}\, m} = \mathrm{e}^{-\beta E_0}\, Z_1^N,$$

wobei $Z_1 = \sum_{m=-S}^{S} \mathrm{e}^{\beta B_{\text{eff}}\, m}$ die Zustandssumme für einen beliebigen Spin im Magnetfeld B_{eff} ist und m der Eigenwert des Spinoperators in z-Richtung bezeichnet.

Unter Verwendung der geometrischen Reihe erhalten wir für die beiden Fälle in denen $2S$ gerade und ungerade ist:

$$Z_{\text{MF}} = \mathrm{e}^{-\beta E_0} \left\{ \frac{\sinh\left[\beta B_{\text{eff}}(2S+1)/2\right]}{\sinh\left[\beta B_{\text{eff}}/2\right]} \right\}^N = \mathrm{e}^{-3\beta N J \langle s^z \rangle^2} \left\{ \frac{\sinh\left[3\beta J \langle s^z \rangle (2S+1)\right]}{\sinh\left(3\beta J \langle s^z \rangle\right)} \right\}^N. \tag{4}$$

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

Lösung:

Spinerwartungswert $\langle s^z \rangle$ (für einen beliebigen Spin):

$$\begin{aligned}
\langle s^z \rangle &= \frac{\sum_{\{s_i^z=-S\}}^{+S} s_i^z e^{\beta B_{\text{eff}} s_i^z}}{Z_1} = \frac{1}{Z_1} \frac{\partial Z_1}{\partial(\beta B_{\text{eff}})} \\
&= -\frac{1}{2}\left[(2S+1)\coth\frac{\beta B_{\text{eff}}(2S+1)}{2} + \coth\frac{\beta B_{\text{eff}}(2S+1)}{2}\right].
\end{aligned}$$

Somit ist (mit $M = N\langle s^z \rangle$ und $B_{\text{eff}} = zJM/N$)

$$\frac{M}{N} = -\frac{1}{2}\left[(2S+1)\coth\frac{z\beta J(2S+1)M}{2N} - \coth\frac{z\beta JM}{2N}\right].$$

Nun betrachten wir Gleichung

$$x = g(x) = \frac{\beta J}{4}(2S+1)\coth(z(2S+1)x) - \frac{\beta J}{4}\coth(zx)$$

Wenn die Steigung von $g(x)$ im Ursprung größer ist als die von x, so gibt es Lösungen $x = \beta JM/(2N) \neq 0$, also für:

$$x'\Big|_{x=0} = 1 < g'(x)\Big|_{x=0} = \frac{z\beta J}{3} S(S+1) \tag{5}$$

$$k_B T < \frac{zJ}{3} S(S+1)$$

Somit ist für $z = 6$

$$T_c = \frac{2JS(S+1)}{k_B}. \tag{6}$$

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

$$f(\varphi) = f_N + \frac{t}{2}\,\varphi^2 + b\,\varphi^4 \tag{7}$$

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

Lösung:

Gesucht ist das Landau-Funktional bis zur Ordnung $\sim \varphi^4$ in der Nähe des Phasenübergangs. Mit Gleichung (4) lautet die freie Energie ($z = 6$):

$$F = 3NJ\langle s^z\rangle^2 - \frac{N}{\beta}\ln\frac{\sinh\left[3(2S+1)\beta J\langle s^z\rangle\right]}{\sinh\left(3\beta J\langle s^z\rangle\right)}. \tag{8}$$

Mit $\varphi = M/N = \langle s^z\rangle \ll 1$ wird der Ausdruck für die freie Energie entwickelt:

$$\begin{aligned} F \approx & -\frac{N}{\beta}\ln(2S+1) + 3NJ\varphi^2 - 6\beta NS(S+1)J^2\varphi^2 \\ & + \frac{18\beta^3}{5}NS(S+1)(1+2S+2S^2)J^4\varphi^4. \end{aligned} \tag{9}$$

Der Term $\sim \varphi^2$ kann umgeformt werden zu

$$3NJ\varphi^2\left[1 - \frac{2J}{k_BT}S(S+1)\right] = 3NJ\frac{T-T_c}{T}\varphi^2.$$

Für $T \simeq T_c$ kann überall, wo T nur als Vorfaktor eingeht, $T = T_c$ ersetzt werden, also überall außer in $(T - T_c)$. Damit wird auch

$$\beta \to \frac{1}{k_BT_c} = \frac{1}{2JS(S+1)}$$

$$\Rightarrow \quad f(\varphi) = \frac{F}{N} = -2JS(S+1)\ln(2S+1) + 3J\frac{T-T_c}{T_c}\varphi^2 + \frac{9\,J(1+2S+2S^2)}{20\,S^2(S+1)^2}\,\varphi^4.$$

Durch Vergleich mit Gleichung (7) erhält man

$$f_N = -2JS(S+1)\ln(2S+1), \tag{10}$$

$$t = 6J\frac{T-T_c}{T_c} = 6J\left[\frac{k_BT}{2JS(S+1)} - 1\right], \tag{11}$$

$$b = \frac{9\,J(1+2S+2S^2)}{20\,S^2(S+1)^2}. \tag{12}$$

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 $J_{ij} = J_{ji}$:

$$H = -\sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j. \tag{13}$$

(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.

Lösung:

Zunächst leiten wir eine Relation her, um den Ausdruck für die Zustandssumme später weiter vereinfachen zu können. Unter Verwendung des Tipps zur Reihenentwicklung des $\ln(\cosh z)$ erhält man

$$\begin{aligned}\sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{-\alpha\sum_i L_i\sigma_i} &= \sum_{\{\sigma_i\}}\prod_i \mathrm{e}^{-\alpha L_i\sigma_i} = \prod_i \sum_{\{\sigma_i\}=-1}^{1} \mathrm{e}^{-\alpha L_i\sigma_i} = 2^N \prod_i \cosh(\alpha L_i) \\ &= 2^N \prod_i \mathrm{e}^{\ln[\cosh(\alpha L_i)]} \approx 2^N \prod_i \exp\left[\underbrace{\left(\frac{\alpha^2}{2}L_i^2 - \frac{\alpha^4}{12}L_i^4\right)}_{=:\lambda}\right]. \end{aligned} \tag{14}$$

Wir setzen $L_i = \sum_j 2\sqrt{2}J_{ij}\varphi_j$ und $\alpha = \frac{\beta}{2}$, womit wir für den Exponenten folgende Gleichung erhalten

$$\begin{aligned}\lambda &= \beta^2 \sum_{i,j,k} J_{ij}J_{ik}\varphi_j\varphi_k - \frac{\beta^4}{3}\sum_{i,j,k,l,m} J_{ij}J_{ik}J_{il}J_{im}\varphi_j\varphi_k\varphi_l\varphi_m \\ &= \beta^2 \sum_{i,j}\varphi_i\sum_k J_{ik}J_{kj}\varphi_j - \frac{\beta^4}{3}\sum_{i,j,k,l,m} J_{ij}J_{ik}J_{il}J_{im}\varphi_j\varphi_k\varphi_l\varphi_m \end{aligned} \tag{15}$$

Im letzten Schritt wurde die Symmetrie der Kopplung verwendet. Die Zustandssumme für das Ising-Modell lässt sich mit der angegebenen Gleichung für die Hubbard-Stratonovich-Transformation (HS) vereinfachen

$$\begin{aligned} Z &= \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n} \overset{(13)}{=} \sum_{\{\sigma_i\}} \mathrm{e}^{-\beta\sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j} \\ &\overset{HS}{=} \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{N/2}\sqrt{\det\hat{J}}\int\left(\prod_i \mathrm{d}\varphi\right)\sum_{\{\sigma_i\}}\exp\left[-\frac{\beta}{2}\sum_{i,j}(\varphi_i + 2\sqrt{2}\sigma_i)J_{ij}\varphi_j\right] \\ &\overset{(1),(15)}{=} \left(\frac{8\beta}{\pi}\right)^{N/2}\sqrt{\det\hat{J}}\int\left(\prod_i \mathrm{d}\varphi_i\right)\exp\left[-\beta\sum_{i,j}\varphi_i\left(\frac{1}{2}J_{ij} - \beta\sum_k J_{ik}J_{kj}\right)\varphi_j\right] \\ &\times \exp\left[-\frac{\beta^4}{3}\sum_{i,j,k,l,m} J_{ij}J_{ik}J_{il}J_{im}\varphi_j\varphi_k\varphi_l\varphi_m\right]. \end{aligned} \tag{16}$$

(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

$$Z \simeq \left(\frac{2\pi\beta}{N^2}\right)^{N/2} \sqrt{\det \hat{J}} \int \left(\prod_{\vec{k}} d\varphi_{\vec{k}}\right) \exp\left\{-\beta\mathcal{F}[\varphi_{\vec{k}}]\right\}, \tag{17}$$

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

Lösung:

Zunächst wird das Vorzeichen der Fouriertransformation definiert. Sei hierzu $f_i = f(r_i)$ eine Funktion im Ortsraum, dann gilt

$$f_i = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}} f_{\vec{q}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}}. \tag{18}$$

An obiger Gleichung sieht man, aus $f(r_i) = f(-r_i)$ folgt $f_{\vec{k}} = f_{-\vec{k}}$. Man setzt nun $r_i \mapsto r_i - r_j$ und somit $f_{ij} = f_{ji}$. Die Fouriertransformation wird verwendet um den Exponenten der Zustandssumme umzuschreiben. Da dieser aus drei Termen besteht, nehmen wir uns jeden einzeln vor. Für den ersten Term gilt

$$\begin{aligned}\sum_{i,j} \varphi_i J_{ij}\varphi_j &= \frac{1}{N^3}\sum_{i,j}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_3} \varphi_{\vec{q}_1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}_1\vec{r}_i} J_{\vec{q}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}_2(\vec{r}_i-\vec{r}_j)}\varphi_{\vec{q}_3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}_3\vec{r}_j} \\ &= \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_3} \delta_{\vec{q}_1+\vec{q}_2}\delta_{\vec{q}_2-\vec{q}_3}\varphi_{\vec{q}_1}J_{\vec{q}_2}\varphi_{\vec{q}_3} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\varphi_{\vec{q}}J_{\vec{q}}\varphi_{-\vec{q}},\end{aligned} \tag{19}$$

wobei $\delta_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}$ das Kronecker-Delta $\delta_{\vec{q}_1,\vec{q}_2}$ darstellt. Da J im Ortsraum symmetrisch ist wurde wurde im letzten Schritt die, oben im Text diskutierte, Antisymmetrie von $J_{\vec{q}}$ ausgenutzt. Analog gilt für den zweiten Term

$$\sum_{i,j,k}\varphi_i J_{ik}J_{kj}\varphi_j = \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\varphi_{\vec{q}}J_{\vec{q}}J_{\vec{q}}\varphi_{-\vec{q}}. \tag{20}$$

Für den letzten Term gilt

$$\sum_{i,j,k,l,m} J_{ij}J_{ik}J_{il}J_{im}\varphi_j\varphi_k\varphi_l\varphi_m = \frac{1}{N^3}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_3} J_{\vec{q}_1}J_{\vec{q}_2}J_{\vec{q}_3}J_{-\vec{q}_1-\vec{q}_2-\vec{q}_3}\varphi_{\vec{q}_1}\varphi_{\vec{q}_2}\varphi_{\vec{q}_3}\varphi_{-\vec{q}_1-\vec{q}_2-\vec{q}_3}. \tag{21}$$

Mit Gleichung (19) - (21) ergibt sich der Ausdruck für die Zustandssumme zu

$$Z \propto \left(\frac{8\beta}{\pi}\right)^{N/2}\sqrt{\det\hat{J}}\int\left(\prod_{\vec{q}}\mathrm{d}\varphi_{\vec{q}}\right)\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{F}[\varphi_{\vec{q}}]}, \tag{22}$$

mit

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[\varphi_{\vec{q}}] = \frac{1}{2N}\sum_{\vec{q}}\varphi_{\vec{q}}(J_{\vec{q}} - 2\beta J_{\vec{q}}^2)\varphi_{-\vec{q}} \\ + \frac{\beta^3}{3N^3}\sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_3} J_{\vec{q}_1}J_{\vec{q}_2}J_{\vec{q}_3}J_{-\vec{q}_1-\vec{q}_2-\vec{q}_3}\varphi_{\vec{q}_1}\varphi_{\vec{q}_2}\varphi_{\vec{q}_3}\varphi_{-\vec{q}_1-\vec{q}_2-\vec{q}_3}.\end{aligned} \tag{23}$$

Die Wechselwirkung soll nur zwischen den nächsten Nachbarn gelten. Ist $|\vec{a}|$ der Abstand der Spins, so erhält man

$$J_{\vec{q}} = \sum_{i,j} J_{ij} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \approx J(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\vec{a}} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{a}}) = 2J \sum_{i=1}^{3} \cos(q_i a).$$

Für $k \ll 1/a$ kann der Kosinus genähert werden und da nur Terme, welche unabhängig von k sind, mitgenommen werden sollen erhält man

$$J_{\vec{q}} = 6J - Ja^2 \sum_i q_i^2 + \mathcal{O}(q^3) \approx 6J - Ja^2 \vec{q}^2. \tag{24}$$

Wir führen den Kopplungskoeffizient $J_0 = 6J$ im dreidimensionalen kubischen Gitter ein. Der in φ quadratische Term im Funktional $\mathcal{F}$ wird durch obige Näherung approximiert:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} (J_{\vec{q}} - 2\beta J_{\vec{q}}^2) \varphi_{-\vec{q}} &= \frac{J_0}{2N} \sum_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} \left(1 - 2\beta J_0 + \frac{a^2}{6} (4\beta J_0 - 1) \vec{q}^2 + \mathcal{O}(q^3) \right) \varphi_{-\vec{q}} \\ &=: V \sum_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} \left(\frac{t}{2} + \frac{K}{2} \vec{q}^2 \right) \varphi_{-\vec{q}} + \mathcal{O}(q^3). \end{aligned} \tag{25}$$

Zusammenfassend ergibt sich also für das Funktion aus Gleichung (23)

$$\mathcal{F}[\varphi_{\vec{q}}] \approx V \sum_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} \left(\frac{t}{2} + \frac{K}{2} \vec{q}^2 \right) \varphi_{-\vec{q}} + Vb \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3} \varphi_{\vec{q}_1} \varphi_{\vec{q}_2} \varphi_{\vec{q}_3} \varphi_{-\vec{q}_1 - \vec{q}_2 - \vec{q}_3}. \tag{26}$$

Hier wurde definiert

$$t = \frac{J_0}{NV}(1 - 2\beta J_0), \quad K = \frac{J_0 a^2 (4\beta J_0 - 1)}{6NV}, \quad b = \frac{\beta^3 J_0^4}{3N^3 V}. \tag{27}$$

(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:

$$\mathcal{F}[\varphi(\vec{r})] = \int d^3 r \left[\frac{t}{2} \varphi^2(\vec{r}) + b\varphi^4(\vec{r}) + \frac{K}{2} \left| \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}) \right|^2 \right]. \tag{28}$$

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

Lösung:

Unter Verwendung der kontinuierlichen Fouriertransformation kann $\vec{k}^2$ in eine zweite Ableitung umgeschrieben werden, womit sich für den quadratischen Term in φ folgender Ausdruck ergibt

$$\begin{aligned} &V \sum_{\vec{q}} \varphi_{\vec{q}} \left(\frac{t}{2} + \frac{K}{2} \vec{q}^2 \right) \varphi_{-\vec{q}} \\ &= V \int \frac{V \mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \int \frac{\mathrm{d}^3 r_1}{V} \varphi(r_1) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}_1} \left(\frac{t}{2} + \frac{K}{2} \vec{q}^2 \right) \int \frac{\mathrm{d}^3 r_2}{V} \varphi(r_2) \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}_2} \\ &= \int \mathrm{d}^3 r\, \varphi(r) \left(\frac{t}{2} - \frac{K}{2} \vec{\nabla}^2 \right) \varphi(r) = \int \mathrm{d}^3 r \left(\frac{t}{2} \varphi(r)^2 + \frac{K}{2} \left[\vec{\nabla} \varphi(r) \right]^2 \right). \end{aligned} \tag{29}$$

Im letzten Schritt wurde ausgenutzt, dass der Term $\vec{\nabla}^2\varphi(r)^2$ auf dem Rand des Integrals verschwindet. Für den φ^4 Term gilt

$$\frac{\beta^3 J_0^4}{3N^3} \sum_{\vec{q}_1,\vec{q}_2,\vec{q}_3} \varphi_{\vec{q}_1}\varphi_{\vec{q}_2}\varphi_{\vec{q}_3}\varphi_{-\vec{q}_1-\vec{q}_2-\vec{q}_3} = b\int \varphi(r)^4. \tag{30}$$

Damit ergibt sich die Form der Zustandssumme gerade zu Gleichung (28). Aus der Vorlesung ist, aus dem Zusammenhang der Landau-Ginsburg Theorie, bekannt, dass der Koeffizient $t \propto T - T_c$ ist. Man setzt $t = \frac{J_0}{NV}\frac{T-T_c}{T}$ und fordert, dass der Ordnungsparameter φ am Übergangspunkt gleich Null ist (dementsprechend $T = T_c$). Aus dieser Forderung folgt $t = 0$ bzw.

$$T_c = \frac{2J_0}{k_B} = \frac{12J}{k_B}. \tag{31}$$

Für Temperaturen überhalb der kritischen Temperatur verschwindet der Ordnungsparameter, also sind für die Betrachtung der Wärmekapazität nur Temperaturen unterhalb der kritischen Temperatur interessant. Um die Wärmekapazität am Übergangspunkt zu bestimmen wird die freie Energie im stationären Zustand betrachtet. Betrachtet man Gleichung (28), so erkennt man, dass die freie Energie ein Minimum besitzt für einen verschwindenden Gradienten von $\vec{\nabla}\varphi(\vec{q})$. Der Ordnungsparameter weist keine Abhängigkeit mehr vom Ort auf. Man nimmt an, dass das System sich nahe des Minimums befindet und es gilt somit

$$F = \int \mathrm{d}^3 r \left[\frac{t}{2}\varphi^2 + b\varphi^4\right] = V\left[\frac{t}{2}\varphi^2 + b\varphi^4\right].$$

Unter verwendung der Euler-Lagrange-Gleichung folgt somit

$$\frac{\partial F}{\partial \varphi} = V\left[t\varphi + 4b\varphi^3\right] \quad \Rightarrow \quad \varphi_0 = \sqrt{-\frac{t}{4b}}. \tag{32}$$

Setzt man dies in die Gleichung für die freie Energie, so erhält man

$$F = -V\frac{t^2}{16b} = -\frac{(1-2\beta J_0)^2 3N}{16\beta^3 J_0}. \tag{33}$$

Für die Wärmekapazität gilt

$$c = -T\left(\left.\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right|_{T=T_c}\right) = \frac{3Nk_B}{2}\frac{T}{T_c} = \frac{3Nk_B T}{24J}, \quad T \leq T_c. \tag{34}$$

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

$$c = \begin{cases} c_{\max}\left(\frac{2T}{T_0} - 1\right), & \frac{T_0}{2} < T < T_0, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{35}$$

gegeben.

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

Lösung:

Um die Aufgabe zu lösen macht man sich zunächst klar, dass das System von einem geordneten Zustand (bei $T = 0$) in einen vollständig ungeordneten Zustand (bei $T > T_0$ übergeht. Das bedeutet das System, also die Spins, ist bei $T = 0$ vollständig geordnet und somit ist die Entropie Null. Bei $T > T_0$ ist das System maximal ungeordnet, das heisst, dass die Entopie gerade folgenden Ausdruck annimmt

$$S = k_B T \ln(2^N). \tag{36}$$

Nimmt man die Definition der Wärmekapazität und verwendet den Ansatz (35), so erhält man ebenfalls einen Ausdruck für die Entropie

$$S = \int_{T_0}^{T} \mathrm{d}S = \int_{T_0}^{T} \frac{\mathrm{d}T}{T} c = c_{\max} \int_{T_0/2}^{T_0} \frac{\mathrm{d}T}{T} \left(\frac{2T}{T_0} - 1 \right) = c_{\max}(1 - \ln 2). \tag{37}$$

Vergleicht man beide Ausdrücke miteinander, so erhält man die Abhängigkeit von c_{max} von der Teilchenzahl N

$$c_{\max} = k_B \frac{\ln 2}{1 - \ln 2} N. \tag{38}$$