$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} J_{ij}\,\hat{\underline{J}}_i\cdot\hat{\underline{J}}_j + \frac{g}{\hbar}\mu_B\sum_{i=1}^{N}\hat{\underline{J}}_i\cdot\underline{B}_0$$

$$\underline{J}_i = \langle\hat{\underline{J}}_i\rangle + \delta\hat{\underline{J}}_i$$

$$\hat{H} \to \hat{H}^{MF} = \frac{g\mu_B}{\hbar}\sum_{i=1}^{N}\hat{\underline{J}}_i\cdot\underline{B}_i^{eff}$$

$$\underline{B}_i^{eff} = -\frac{\hbar}{g\mu_B}\sum_{j=1}^{N} J_{ij}\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle + \underline{B}_0$$

$$\hat{H}^{MF} = -\sum_{i=1}^{N}\hat{\underline{\mu}}_i\cdot\underline{B}_i^{eff}$$ Meanfield-Hamiltonian

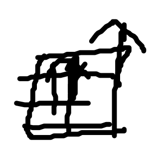
Einteilchen-Struktur, wie beim Paramagnet!

speziell $\underline{B}_0 = B_0\hat{\underline{e}}_z$ $\longrightarrow$ man kann davon ausgehen, daß $\langle\hat{\underline{J}}_j\rangle \sim \hat{\underline{e}}_z \Rightarrow \underline{B}_i^{eff} \sim \hat{\underline{e}}_z$

$\Rightarrow \langle\hat{\underline{J}}_j\rangle \to \langle\hat{J}_{j,z}\rangle$

spezialisieren weiter auf den Fall "homogene" Kopplung

$$J_{ij} = \frac{J_0}{N} \leftarrow \text{Konstante}$$



$$\Rightarrow \left(\underline{B}_i^{eff}\right)_z = -\frac{\hbar}{g\mu_B}\sum_{j=1}^{N}\frac{J_0}{N}\underbrace{\langle \hat{J}_{j,z}\rangle} + B_0$$

hängt nicht mehr von j ab!
„Translations-Invarianz“

$$= -\frac{\hbar}{g\mu_B} J_0 \langle \hat{J}_z \rangle + B_0$$

$$= B_z^{eff}$$

betrachte Magnetisierung pro Teilchen

$$m = \frac{1}{N}\left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\mu}_{i,z} \right\rangle$$

$$= -\frac{g\mu_B}{\hbar}\frac{1}{N}\left\langle \sum_{i=1}^{N} J_{i,z}\right\rangle \overset{\substack{\text{Translations-}\\ \text{Invarianz}\\ \downarrow}}{=} -\frac{g\mu_B}{\hbar}\langle J_z\rangle$$

$\Rightarrow$ <u>Effektives Feld</u> $B_z^{eff} = \underbrace{\lambda m} + B_0$

mit $\lambda = \frac{\hbar^2}{(g\mu_B)^2} J_0$

Meanfield-Beitrag proportional zur Magnetisierung!

Magnetisierung als Fkt. von T, B_0

$$m = \frac{M}{N} = g\mu_B J \underbrace{B_J}_{\text{Brillouin-Funktion}}\left(\beta g\mu_B J(\lambda m + B_0)\right)$$

III.4. Meanfield-Gleichungen für das Ising-Modell aus dem Variationsprinzip

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\langle ij\rangle} s_i J_{ij} s_j \quad \text{mit } s_i = \pm\frac{1}{2}$$

nächste-Nachbar Wechselwirkung

$J_{ii} = 0$, $J_{ij} = \begin{cases} J & \text{, falls } i,j \text{ nN} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

z nächste Nachbarn

Die folgende Methode kann auch für andere H angewandt werden, z.B. Gittergas-Modelle

Gibbs–Bogoliubov Ungleichung
(aus Störungstheorie)

$$\boxed{F \leq \Phi = \langle H - H_0 \rangle_0 + F_0}$$

Freie Energie des interessierenden Systems

Hamiltonoperator eines "einfachen Systems", das man exakt behandeln kann (Referenzsystem)

Φ ist also obere Schranke für F

$\Rightarrow$ Bestmögliche Näherung für F ergibt sich aus einer Minimierung von Φ bzgl. "geeigneter" Variationsparameter

$\langle \ldots \rangle_0$ kanonischer Mittelwert mit der durch H_0 definierten Verteilung

$$\rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H_0}$$

$$F_0 = -k_B T \ln Z_0$$

Ansatz: $H_0 = \sum_{i=1} s_i h_i$

Variationsparameter

$$\rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H_0} = \prod_{i=1}^{N} \rho_{0,i} \quad \text{mit} \quad \rho_{0,i} = \frac{e^{-\beta s_i h_i}}{\left.\mathrm{Tr}_{s_i}\, e^{-\beta s_i h_i}\right\} Z_{0,i}}$$

$$\text{mit} \quad \mathrm{Tr}_{s_i} = \sum_{s_i = \pm\frac{1}{2}}$$

$$F_0 = -k_B T \ln Z_0 = -k_B T \ln\left(\prod_{i=1}^{N} Z_{0,i}\right) = -k_B T \sum_{i=1}^{N} \ln Z_{0,i}$$

$$\Phi = \underbrace{\langle H - H_0 \rangle_0}_{\langle H \rangle_0 - \langle H_0 \rangle_0} + F_0$$

$$\langle H \rangle_0 = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle s_i s_j \rangle_0$$

$$\langle H_0 \rangle_0 = + \sum_{i=1}^{N} \langle s_i \rangle_0 h_i$$

betrachte

$$\langle s_i s_j \rangle_0 = \mathrm{Tr}\, \rho_0\, s_i s_j \qquad \text{mit} \quad \mathrm{Tr} = \sum_{s_1 = \pm\frac{1}{2}} \cdots \sum_{s_N = \pm\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_0}\, s_i s_j}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_0}}$$

$$= \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \sum_k s_k h_k}\, s_i s_j$$

$$\overline{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta \sum_k s_k h_k}}$$

alle Terme im Zähler und Nenner mit $k \neq i,j$ ~~...~~ kürzen sich!

$$\langle s_i s_j \rangle_0 = \frac{\mathrm{Tr}_{s_i} \mathrm{Tr}_{s_j}\, s_i s_j\, e^{-\beta s_i h_i - \beta s_j h_j}}{\mathrm{Tr}_{s_i} \mathrm{Tr}_{s_j}\, e^{-\beta s_i h_i - \beta s_j h_j}}$$

$$= \langle s_i \rangle_0 \langle s_j \rangle_0 \quad !$$

$$\Phi = \langle H - H_0 \rangle_0 + F_0$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \langle s_i \rangle_0 \langle s_j \rangle_0 - \sum_{i=1}^{N} \langle s_i \rangle_0 h_i - k_B T \sum_{i=1}^{N} \ln Z_{0,i}$$

Minimiere Φ bzgl. der "Hilfsfelder" h_k

Verlange: $\frac{\partial \Phi}{\partial h_k} = 0 \quad \forall\, k = 1, \dots, N$

$$\Leftrightarrow -\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij} \frac{\partial \langle S_i\rangle_0}{\partial h_k} \langle S_j\rangle_0 - \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial \langle S_i\rangle_0}{\partial h_k} h_i$$

$$-\sum_i \langle S_i\rangle_0 \frac{\partial h_i}{\partial h_k} - \sum_{i=1}^{N} k_B T \frac{\partial \ln Z_{0,i}}{\partial h_k} \stackrel{!}{=} 0 \quad (*)$$

beachte: $\frac{\partial \langle S_i\rangle_0}{\partial h_k} = \delta_{ik} \frac{\partial \langle S_k\rangle_0}{\partial h_k}$

$$\frac{\partial h_i}{\partial h_k} = \delta_{ik}$$

$$k_B T \sum_i \frac{\partial \ln Z_{0,i}}{\partial h_k} = k_B T \sum_i \frac{1}{Z_{0,i}} \frac{\partial Z_{0,i}}{\partial h_k}$$

$$= k_B T \sum_i \frac{1}{Z_{0,i}} \delta_{ik} \frac{\partial Z_{0,k}}{\partial h_k}$$ mit $Z_{0,k} = \sum_{S_k = \pm\frac{1}{2}} e^{-\beta S_k h_k}$

$$= k_B T \frac{1}{Z_{0,k}} \sum_{S_k=\pm\frac{1}{2}} (-\beta) S_k e^{-\beta S_k h_k}$$

$$= -\langle S_k\rangle_0$$

alles einsetzen in (*)

$$-\sum_{j=1}^{z} J_{kj} \langle s_j \rangle_0 \frac{\partial \langle s_k \rangle_0}{\partial h_k}$$

$$-\frac{\partial \langle s_k \rangle_0}{\partial h_k} h_k \overset{!}{=} 0$$

dividiere noch durch $\frac{\partial \langle s_k \rangle_0}{\partial h_k}$

Erinnerung

$H_0 = \sum_i s_i h_i$

↑ Variations-parameter

$$\Longrightarrow \boxed{h_k = -\sum_{j=1}^{z} J_{kj} \langle s_j \rangle_0}$$

Ergebnis: Das lokale Feld h_i ist proportional zu den mittleren Spins auf die Nachbarplätze!

betrachte jetzt Magnetisierung eines Teilchens i

aus Variation

$$m_i = \langle S_i \rangle_0 = \frac{\sum_{s_i=\pm\frac{1}{2}} s_i e^{-\beta H_0^i}}{\sum_{s_i=\pm\frac{1}{2}} e^{-\beta H_0^i}} = \frac{\sum_{s_i=\pm\frac{1}{2}} s_i e^{+\beta \sum_{j=1}^{z} J_{ij} s_i \langle S_j \rangle_0}}{\sum_{s_i=\pm\frac{1}{2}} e^{+\beta \sum_{j=1}^{z} J_{ij} s_i \langle S_j \rangle_0}}$$

$H_0^i = s_i h_i$

transformiere $s_i \to \pm 1$

$$= \frac{e^{+\beta \sum_{j=1}^{z} J_{ij} \langle S_j \rangle_0} - e^{-\beta \sum_j J_{ij} \langle S_j \rangle_0}}{\text{"} \quad + \quad \text{"}}$$

$$\langle S_i \rangle_0 = \tanh\left(\beta \sum_{j=1}^{z} J_{ij} \langle S_j \rangle_0\right)$$

speziell: $J_{ij} = \begin{cases} J & \text{, falls } i,j \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

$$\Rightarrow \langle S_i \rangle_0 = \langle S \rangle_0 = m$$

$$\boxed{m = \tanh(\beta z J m)}$$

Übergang zum "infinite-range" Modell

$z \to N$, $J \to \frac{J}{N}$

(mit homogenem Magnetfeld h_0 : $m = \tanh(\beta z J m + \beta h_0)$

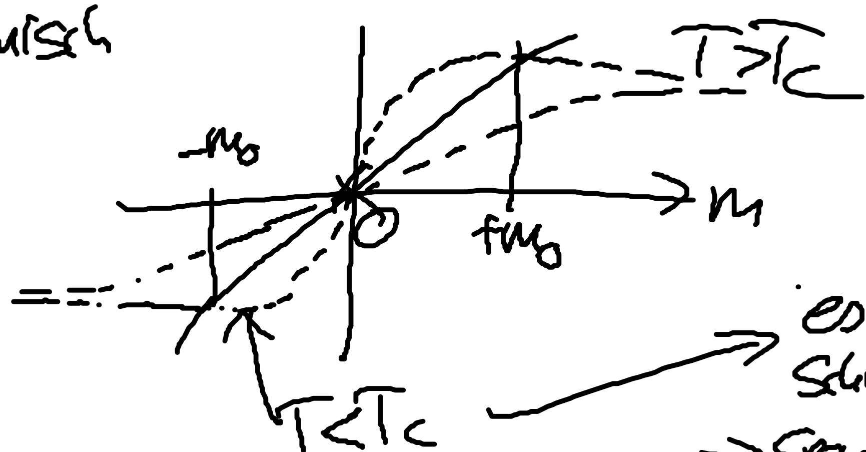
III.5 Kritisches Verhalten im Ising-Modell

betrachte Ising-Modell mit unendlich reichweitigen Wechselwirkung

$$\boxed{m = \tanh(\beta J m)}$$

kann spontane Magnetisierung beschreiben

graphisch



→ Schnittpunkt bei $m = 0$

⇒ keine Magnetisierung!

es gibt auch Schnittpunkte bei $m = \pm m_0$!

⇒ spontane Magnetisierung