23.1.

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\,\sigma_i\sigma_j - \sum h_i \sigma_i$$

$$\delta\sigma_i \equiv \sigma_i - \langle\sigma_i\rangle$$

$$\sigma_i\sigma_j = \left(\delta\sigma_i + \langle\sigma_i\rangle\right)\left(\delta\sigma_j + \langle\sigma_j\rangle\right)$$

$$= \delta\sigma_i\,\delta\sigma_j + \delta\sigma_i\langle\sigma_j\rangle + \delta\sigma_j\langle\sigma_i\rangle + \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle$$

$$= \delta\sigma_i\,\delta\sigma_j + \sigma_i\langle\sigma_j\rangle + \sigma_j\langle\sigma_i\rangle$$

$$- \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle$$

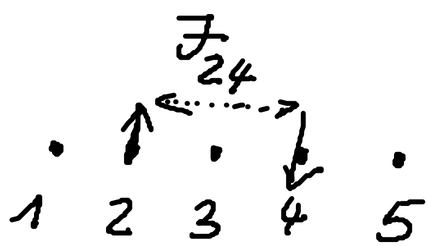
Damit

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\Big(\underbrace{\delta\sigma_i\,\delta\sigma_j}_{\text{quadr. in Fluktuationen } (\delta\sigma)^2} + \sigma_i\langle\sigma_j\rangle + \sigma_j\langle\sigma_i\rangle - \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle\Big) - \sum h_i\sigma_i$$

$$\equiv \mathcal{H}^{MF} - \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\,\delta\sigma_i\,\delta\sigma_j$$

$J_{ij} = J_{ji}$

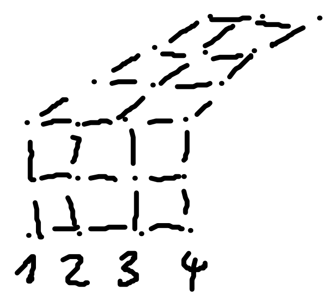
$$\mathcal{H}^{MF} \equiv -\sum_{ij} J_{ij}\,\sigma_i\langle\sigma_j\rangle - \sum h_i\sigma_i + \underbrace{\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle}_{}$$




↓

Verschiebung der GZ-Energie, fällt bei Berechnung von

$$\hat{\rho}_{MF} = \frac{e^{-\beta H_{MF}}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_{MF}}}$$




$\longrightarrow (ijk)$

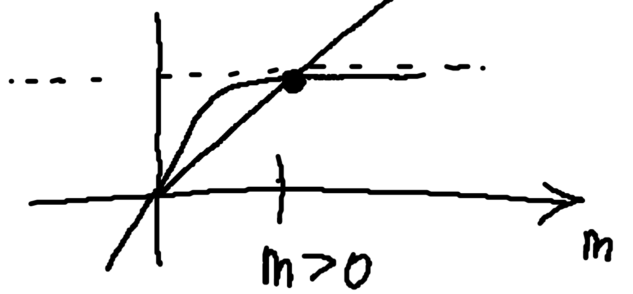
$J_{ij} \Longleftrightarrow$ $\upharpoonleft\downharpoonright$ Aufpassen!

Magnetisierung $m = \langle\sigma_i\rangle$

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

unbekannt    unbekannt

$h = 0$




$\beta \mathcal{J} > 1$: spontane Magnetisierung unterhalb der kritischen Temperatur $T_c$

$\mathcal{J} = \sum_i \mathcal{J}_{ij}$ )

$$\boxed{k_B T_c = \mathcal{J}}$$

Konkret: z.B. für nächste-Nachbar-Wechselwirkung

$\cdot \downarrow \uparrow \uparrow \cdot \cdot$ WW zw. benachbarten Spins

$\mathcal{J}_{ij} = j \, \delta_{\langle ij \rangle NN}$    $\mathcal{J} = \sum_i \mathcal{J}_{ij} = j \cdot \underbrace{2d}_{z}$

$z =$ „Koordinationszahl" des Gitters

- Phasenübergang 2. Ordnung von ferromagnetischer ($T < T_c$) zu paramagnetischer Phase.
- $T < T_c$ „spontane Symmetriebrechung"
  $\uparrow, \downarrow$ ($\mathbb{Z}_2$)

- Kritische Exponenten

Zustandsgleichung aus der Selbstkonsistenzgleichungen

Magnetisierung

$$m = \tanh\left(\beta h + \beta J m\right)$$

äußeres Magnetfeld

$\beta = \frac{1}{T}$

$k_B = 1$

$$= \frac{\tanh \beta h + \tanh m \, T_c/T}{1 + (\tanh \beta h)\left(\tanh\left(m \frac{T_c}{T}\right)\right)},$$

$$\tau \equiv \frac{T_c}{T}$$

$$\Rightarrow \tanh \beta h = \frac{m - \tanh m\tau}{1 - m \tanh m\tau}$$

für kleine m

$$\beta h + O(\beta h)^3 = \frac{m - m\tau - \frac{1}{3}(m\tau)^3}{1 - m^2\tau - \frac{1}{3} m (m\tau)^3 - \ldots}$$

$$= \left(m(1-\tau) - \frac{1}{3}(m\tau)^3\right)\left(1 + m^2\tau + O(m^4)\right)$$

$$= m(1-\tau) + m^3\left\{-\tfrac{1}{3}\tau^3 + \tau(1-\tau)\right\} + \ldots O(m^5)$$

$$\Rightarrow \beta h = m(1-\tau) + m^3\left\{\tau - \tau^2 - \tfrac{1}{3}\tau^3\right\} + O(m^5)$$
$$+ O(\beta h)^3$$

Definitionen: $m(T, h \to 0) \propto (-\varepsilon)^{\beta}$

$$\chi_T \propto \begin{cases} (-\varepsilon)^{-\gamma'} & T < T_c \\ \varepsilon^{-\gamma} & T > T_c \end{cases} \qquad \varepsilon = \frac{T}{T_c} - 1$$

$$h \propto m^{\delta} \qquad T = T_c$$

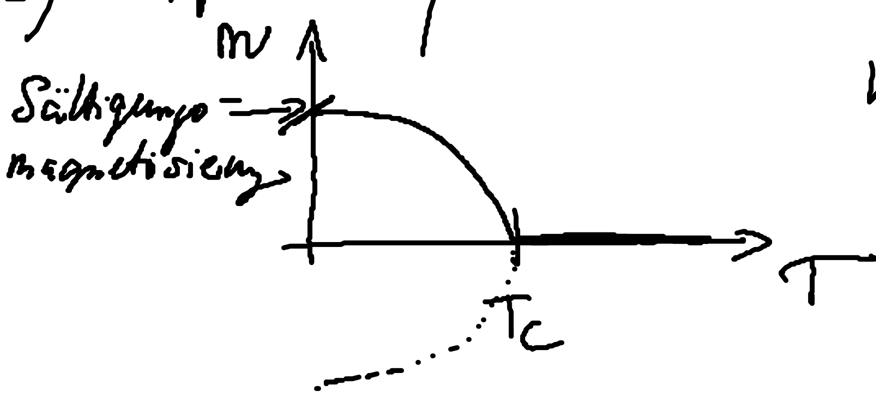
1) Exponent $\delta$: $\tau \equiv T_c/T = 1$

$$\beta h = m \cdot 0 + m^3\left(-\tfrac{1}{3}\right), \quad \beta = \beta_c$$
$$h \propto m^3$$

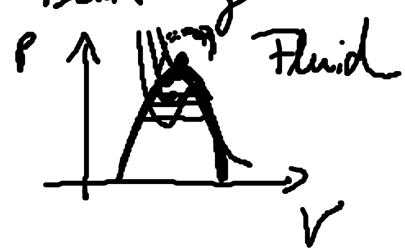
$$\boxed{\delta = 3}$$

2) Exponent $\beta$: ÜA $\beta = \frac{1}{2}$

$h = 0$




Bemerkung



Mean-Field-Methode als „falsche Theorie"

- Falsche Voraussagen von PÜ, die z.B. gar nicht existieren:
  Beispiel $d=1$ - Isingmodell, das keinen PÜ aufweist
  (in $d=1$ exakte Lösung möglich)

- Falsche Werte für die kritischen Exponenten, stimmen z.B. nicht mit denen der exakten Lösung für $d=2$ (Onsager 1944)

- mean-field i.a. als „vorläufige Beschreibung".
- in elektronischen Systemen: Hartree-Fock-Methode.

## Mean-Field-Lösung aus der Feldtheorie

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\,\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i$$

$$e^{-\beta F} = Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\left(\underbrace{\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j}_{e^{\frac{1}{2}\beta \underline{x}^T \underline{\underline{J}}\, \underline{x}}} + \sum_i h_i \sigma_i\right)\beta}$$

$$e^{\frac{1}{2}\beta \underline{x}^T \underline{\underline{J}}\, \underline{x}} = \frac{1}{\sqrt{\det \beta J}} \int \frac{dH_1 \dots dH_N}{\sqrt{2\pi} \cdot \ldots \cdot \sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j + \sum_i H_i \sigma_i}$$

mehrfaches (N-faches) Gauß-Integral!

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ax^2 + \underline{b}x} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{\frac{b^2}{4a}}$$

aus $b^2$ wird $b$

quadr. linear

$$Z = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \frac{1}{\sqrt{\det \beta J}} \int \frac{dH_1}{\sqrt{2\pi}} \cdots \frac{dH_N}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j} \times$$

$$\times\, e^{\beta \sum_i h_i \sigma_i + \sum H_i \sigma_i}$$

$$\prod_{i=1}^{N} 2\cosh(\beta h_i + H_i) =$$

$$= Z_{free}\Big[\underbrace{\beta h_i + \beta}\, H_i/\beta\Big] = e^{-\beta F_{free}}$$

$$\Rightarrow \quad Z = \frac{1}{\sqrt{\det \beta J}} \int \frac{dH_1 \ldots dH_N}{\sqrt{2\pi} \ldots \sqrt{2\pi}} \, e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j} \times$$

$$\times Z_{\text{free}}\left[\beta h_i + \beta \frac{H_i}{\beta}\right]$$

- Zustandssumme $Z$ als gewichtetes Integral über die freie Zustandssumme $Z_{\text{free}}$ des wechselwirkungsfreien Systems in Magnetfeldern

  $h_i$ (äußeres) + $H_i/\beta$

- In $Z$ treten die Spinvariablen $\sigma_i$ gar nicht mehr explizit auf! Stattdessen Beschreibung der WW durch „fluktuierende Felder" $H_i$

- Die Physik ist die gleiche in beiden Beschreibungen
- Die feldtheoretische Beschreibung häufig vorteilhafter.

Jetzt von der Feldtheorie zur MF-Näherung

$$Z = \frac{1}{\sqrt{\det \beta J}} \int \frac{dH_1 \ldots dH_N}{\sqrt{2\pi} \ldots \sqrt{2\pi}} \, e^{-S[H_i]}$$

$$S[H_i] \equiv \frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j - \sum_i \ln 2\cosh(H_i + \beta h_i)$$

„Hubbard-Stratonovich"

Berechnen des Integrals in

Sattelpunktsnäherung.