25.1.07

25.1.07

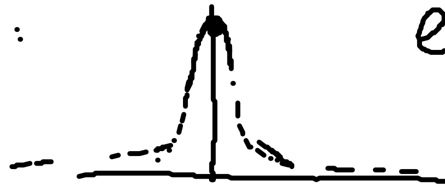
$$Z = \underbrace{\int \mathcal{D}H}\, e^{-S[H]}$$

$$\int \frac{dH_1 \dots dH_N}{(2\pi)^{N/2} \left(\det \beta \mathcal{J}\right)^{1/2}}$$

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

Näherungsweise Berechnung des Integrals: $e^{-f(x)}$

Betrachte Integranden:



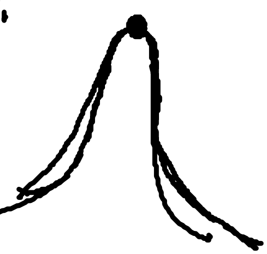
x_0

Dominiert von der Umgebung des Extremums von $f(x)$ bei $x = x_0$

$$Z \approx e^{-S[\overline{H}_i]}, \text{ wobei}$$

$\overline{H}_i$ Extremum von $S[\overline{H}_i]$. „Nullte Näherung"

Nächste Näherung: Jetzt quadratisch um $\overline{H}_i$ entwickeln



$\mathcal{J}_{ij} = \mathcal{J}_{ji}$

Also fordere

$$0 = \frac{\partial S}{\partial \overline{H}_i} = \frac{1}{2\beta} \sum_j \left[\left(\mathcal{J}^{-1}\right)_{ij} \overline{H}_j + \overline{H}_j \left(\mathcal{J}^{-1}\right)_{ji} \right]$$

$$- \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i) \sum_i J_{ik}$$

$$0 = \frac{1}{2\beta} \sum_{ji} \Big[\underbrace{J_{ik} (J^{-1})_{ij}}_{\delta_{kj}} \bar{H}_j + \bar{H}_j \underbrace{(J^{-1})_{ji} J_{ik}}_{\delta_{jk}} \Big] \quad (J_{ik} = J_{ki})$$

$$- \sum_i J_{ik} \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i)$$

$$0 = \frac{1}{\beta} \bar{H}_k - \sum_i J_{ik} \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i)$$

$$\boxed{\frac{1}{\beta} \bar{H}_k = \sum_i J_{ik} \tanh(\bar{H}_i + \beta h_i)}$$

$$\| e^{-\beta F} = Z \|$$

$$m_i = \langle \sigma_i \rangle = \frac{\frac{\partial Z}{\partial \beta h_i}}{Z} = \frac{1}{\beta} \partial_{h_i} \ln Z = -\frac{\partial F}{\partial h_i}$$

$$Z = \sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_N} e^{\beta \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \beta \sum h_i \sigma_i}$$

Jetzt in SP-Näherung $e^{-\beta F} \approx e^{-\beta S[\bar{H}_i]}$

$$m_i = -\frac{\partial F}{\partial h_i} \longmapsto -\frac{\partial S[\bar{H}_i]}{\partial \beta h_i}$$

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

$$m_i = -\underbrace{\frac{\partial S[\bar{H}_i]}{\partial \bar{H}_i}}_{0}\frac{\partial \bar{H}_i}{\partial \beta h_i} + \frac{\partial}{\partial \beta h_i}\sum_i \ln 2\cosh(H_i+\beta h_i)$$

Extremaleigenschaft

$$= \tanh\left(\bar{H}_i + \beta h_i\right)$$

Jetzt $\frac{1}{\beta}\bar{H}_k = \sum_j J_{jk}\underbrace{\tanh(\bar{H}_j+\beta h_j)}_{m_j}$

$$m_i = \tanh\left(\beta\sum_j J_{ji}\, m_j + \beta h_i\right)$$

Also:

$$\boxed{m_i = \tanh\left(\beta\sum_j J_{ji}\, m_j + \beta h_i\right)}$$

- Das ist die Mean-Field-Näherung
- Sattelpunktsnäherung $\hat{=}$ MF
- Quadratische Fluktuationen geben Verbesserung des MF-Ergebnisses
  $\Longrightarrow$ systematische Entwicklung um die MF-Theorie herum.
  „loop-wise" expansion

$$F = U - TS$$

$$= \langle H \rangle - TS$$

Stat. Operator $\quad \rho = \dfrac{e^{-\beta H}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}}$

Gibbs: Variationsprinzip

$$F \leqslant \langle H - TS \rangle =$$

$$= \mathrm{Tr}\, \rho_0 (H + T k_B \ln \rho_0)$$

$$= \underbrace{\mathrm{Tr}\, \rho_0 H}_{\langle H \rangle_0} + k_B T \, \mathrm{Tr}\, \rho_0 \ln \rho_0$$

wobei ρ_0 ein beliebiger GG-Zustand zur Temperatur T ist.

F ist minimal im Vergleich zu allen anderen GG Zuständen ρ_0, „=" für $\rho_0 = \rho$.

(Gibbs-Bogoliubov-Ungleichung)

Beweis: R.P. Feynman „Statistical Physics".

Anwenden für $\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum J_{ij}\,\sigma_i\sigma_j - h\sum \sigma_i$

jetzt „Test-Dichteoperator"

$$\rho_B \equiv \frac{1}{Z_B}\, e^{\beta B \sum \sigma_i}$$

$\uparrow$ Parameter

$$Z_B = N \quad 2\cosh\beta B$$

- $\langle H\rangle$, hierfür:

$$\langle\sigma_i\rangle = \frac{\sum\limits_{\sigma_1\,\sigma_N} \sigma_i\, e^{\beta B[\sigma_1+\dots+\sigma_N]}}{\sum\limits_{\sigma_1\,\sigma_N} e^{\beta B[\sigma_1+\dots+\sigma_N]}}$$

$$= \tanh\beta B$$

$$\underset{i\neq j}{\langle\sigma_i\sigma_j\rangle} = \frac{\sum\limits_{\sigma_1\cdots\sigma_N} \sigma_i\sigma_j\, e^{\beta B[\sigma_1+\dots+\sigma_N]}}{\sum\limits_{\sigma_1\,\sigma_N} e^{\beta B[\sigma_1+\dots+\sigma_N]}}$$

$$= \tanh^2\beta B\,.$$

$i=j$ tragen nichts bei weil $J_{ii} = 0$

Damit
$$\langle H\rangle = -\frac{1}{2}\underbrace{\sum_{ij} J_{ij}}\,\tanh^2\beta B - Nh\tanh\beta B$$

homogen:
$$= \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{1j} = \frac{N}{2}\underbrace{\sum_j J_{1j}} = \frac{N}{2}J$$

$$\langle H\rangle = -\frac{N}{2}J\tanh^2\beta B - Nh\tanh\beta B\ \cancel{J}$$

$$\langle S\rangle = -\underbrace{k_B}_{=1}\,\mathrm{Tr}\,\rho_B \underbrace{\ln \rho_B}_{\ln \frac{e^{+\beta B\sum\sigma_i}}{Z_B}} = -\beta B\left\langle \sum_i \sigma_i\right\rangle + \ln Z_B$$

$$= -\beta B N \tanh \beta B + \ln 2\cosh\beta B$$

Insgesamt:

$$F < \langle H - TS\rangle \equiv \mathcal{F}(B)$$

$$\mathcal{F}(B) \equiv -\frac{N}{2} J \tanh^2 \beta B + N(B-h)\tanh\beta B - TN\ln(2\cosh\beta B)$$

Jetzt minimieren!

$\tanh' x = 1 - \tanh^2 x$

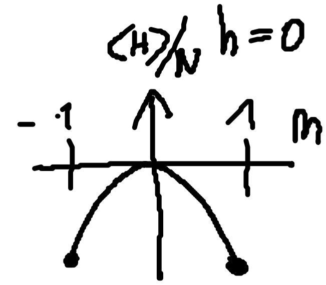
$$\mathcal{F}'(B) = -N\beta J \tanh\beta B\left[1-\tanh^2\beta B\right] + \cancel{N\tanh\beta B} + N(B-h)\beta\left[1-\tanh^2\beta B\right] - \cancel{N\tanh\beta B}$$

$$= N\beta\underbrace{\left(B - h - J\tanh\beta B\right)}_{=0}\left[1-\tanh^2\beta B\right] = 0$$

Selbstkonsistenzgleichung

$$\left.\begin{aligned} B - h &= J \tanh \beta B \\ m &= \tanh \beta B \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} B - h &= J m \\ B &= J m + h \end{aligned}$$

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

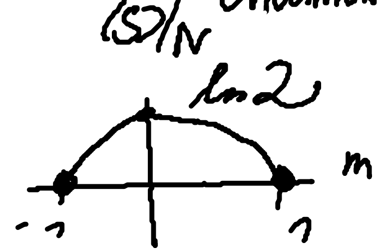


Betrachte nochmals

$$\frac{\langle H \rangle}{N} = -\frac{J}{2} m^2 - h m$$

$$\frac{\langle S \rangle}{N} = -\sum_{\pm} \underbrace{\frac{1 \pm m}{2}}_{p_\pm} \ln \frac{1 \pm m}{2}$$

Shannon-Form



$$F \leq \langle H \rangle - T \langle S \rangle$$

Entwicklung in der Nähe des kritischen Punktes: $|m| \ll 1$

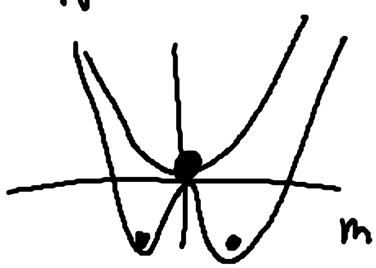
$$\frac{\langle H - TS \rangle}{N} = -\frac{J}{2} m^2 - h m + m (J m + h) - T \ln 2 - \frac{T}{2} \left(m^2 + \frac{1}{2} m^4 + \dots \right)$$

Ans: $$\frac{\langle S \rangle}{N} = -\beta B \underbrace{\tanh \beta B}_{m} + \ln 2\cosh \beta B$$

$$= -\beta(Jm+h)m + \ln 2 + \ln \frac{1}{\sqrt{1-\underbrace{\tanh^2 \beta B}_{m^2}}}$$

$$= -\beta(Jm+h)m + \ln 2 - \frac{1}{2}\underbrace{\ln(1-m^2)}_{-m^2 - m^4 - \dots}$$

$$\frac{\langle H - TS \rangle}{N} = -T\Big[\ln 2 + \underbrace{\tfrac{1}{2}\Big(1-\frac{T_c}{T}\Big)m^2 + \frac{m^4}{4} + \dots}_{O(m^6)}\Big]$$



$$k_B T_c = J$$