Wh:
$$H = -\frac{1}{2}\sum_i\sum_j J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i \quad , \quad s_i = \pm 1$$

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}$$
$$= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} e^{\beta/2 \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j + \beta \sum_i h_i s_i}$$

$$= \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_N} \frac{1}{\sqrt{2\beta \det \underline{\underline{J}}}} \frac{1}{\sqrt{\pi}^N} \int dH_1 \cdots \int dH_N \, e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} H_i (\underline{\underline{J}}^{-1})_{ij} H_j + \sum_i s_i (H_i + \beta h_i)}$$

Hubbard-Stratonovich-Transformation

$$= \frac{1}{\sqrt{2\beta \det \underline{\underline{J}}}} \frac{1}{\sqrt{\pi}^N} \int dH_1 \cdots \int dH_N \, e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} H_i (\underline{\underline{J}}^{-1})_{ij} H_j} Z_0$$

mit $Z_0 = \prod_{i=1}^{N} 2\cosh(H_i + \beta h_i)$

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{}} \int dH_1 \cdots \int dH_N \, e^{-S(\{H_i\})}$$

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

Sattelpunktsnäherung:

$$Z_N \approx e^{-S(\{\bar{H}_i\})}$$

dabei sind $\bar{H}_i$ die Hilfsfelder H_i, an denen S extremal wird!

d.h. $\left.\frac{\partial S}{\partial H_i}\right|_{\{\bar{H}_i\}} \overset{!}{=} 0$

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

Interpretation ?

nenne $Z_{SP} := e^{-S(\{\bar{H}_i\})}$

↑ am Sattelpunkt

Freie Energie : $F_{SP} = -k_B T \ln Z_{SP}$
$= k_B T\, S(\{\bar{H}_i\})$

Frage: Zusammenhang zw. den Hilfsfelder $\bar{H}_i$ und der Physik des Systems?

betrachte Magnetisierung am Platz k:

$$m_k = \langle s_k \rangle \qquad \text{mit } H = -\frac{1}{2}\sum_{ij} s_i J_{ij} s_j - \sum_i h_i s_i$$

$$= \frac{1}{Z_k} \operatorname{Tr} s_k e^{-\beta H}$$

$$= \frac{1}{Z_k} \operatorname{Tr} \frac{\partial}{\partial(\beta h_k)} e^{-\beta H} = \frac{1}{Z_k} \frac{\partial}{\partial(\beta h_k)} Z_k = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_k}{\partial h_k}$$

bis hierhin ist alles exakt! $\qquad = -\frac{\partial F}{\partial h_k}$

benutze nun die Sattelpunktsnäherung:

$$F \to F^{SP} = k_B T\, S(\{\bar{H}_i\})$$

Beachte: Die $\bar{H}_i$ hängen von den h_i über die Extremumsbedingung ab!

$$\Rightarrow m_k = -k_B T \frac{\partial}{\partial h_k} S \Big|_{\{H_i\} = \{\bar{H}_i\}}$$

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

$$\Rightarrow m_k = \underbrace{-k_B T \frac{\partial S}{\partial H_k}}_{\substack{\text{Null, da} \\ S \text{ bei } \{\bar{H}_k\} \\ \text{extremal wird!}}} \Big|_{\{\bar{H}_k\}} \frac{\partial H_k}{\partial h_k} - k_B T \underbrace{\frac{\partial}{\partial h_k} \sum_i \ln 2\cosh(H_i + \beta h_i)}_{\frac{2\sinh(H_k + \beta h_k)}{2\cosh(H_k + \beta h_k)}}$$

Damit folgt:

$$\boxed{m_k = \tanh(\bar{H}_k + \beta h_k)} \quad (*)$$

benutze nun noch, daß:

$$\beta^{-1} \bar{H}_k = \sum_i J_{ik} \underbrace{\tanh(\bar{H}_i + \beta h_i)}_{m_i \text{ wegen } (*)} \quad \text{am Sattelpunkt}$$

$\Rightarrow$ Insgesamt:

$$\boxed{m_i = \tanh\Big(\beta \sum_j J_{ij} m_j + \beta h_i\Big)}$$

Diese Gleichung hat genau dieselbe Form wie die, die wir über die Meanfieldnäherung des Hamiltonian hergeleitet haben!

Spezialfall

„infinite-range" Ising model

d.h. unendlich langreichweitige Wechselwirkung

$$J_{ij} = J_0/N \quad , \quad h_i = h$$

homogenes Feld

$$\Rightarrow H = -\frac{J_0}{2N} \sum_{ij} S_i S_j - \sum_i h S_i$$

man findet:

$$S \sim N \quad !$$

Exponent in der Zustandssumme nach der Hubbard-Stratonovich-Transformation!

$\Rightarrow$ Für $N \to \infty$ (thermodyn. Limes) wird die Sattelpunktsnäherung exakt!

$\Rightarrow$ Für dieses (Infinite-Range) Modell wird die Meanfield-Näherung exakt!!

Ganz grundsätzlich gilt:

Die MF-Näherung wird umso besser, je mehr Wechselwirkungspartner ein Teilchen (Spin, Flüssigkeitsteilchen) hat, und je länger die Reichweite der Wechselwirkung ist!

II. 6. Kritisches Verhalten im unendlich langreichweitigen Ising-Modell

Ausgangspunkt: Gleichung für die ~~Mag~~ Magnetisierung

$$m_i = \tanh\left(\beta \sum_j J_{ij} m_j + \beta h_i\right)$$ allgemeine Form

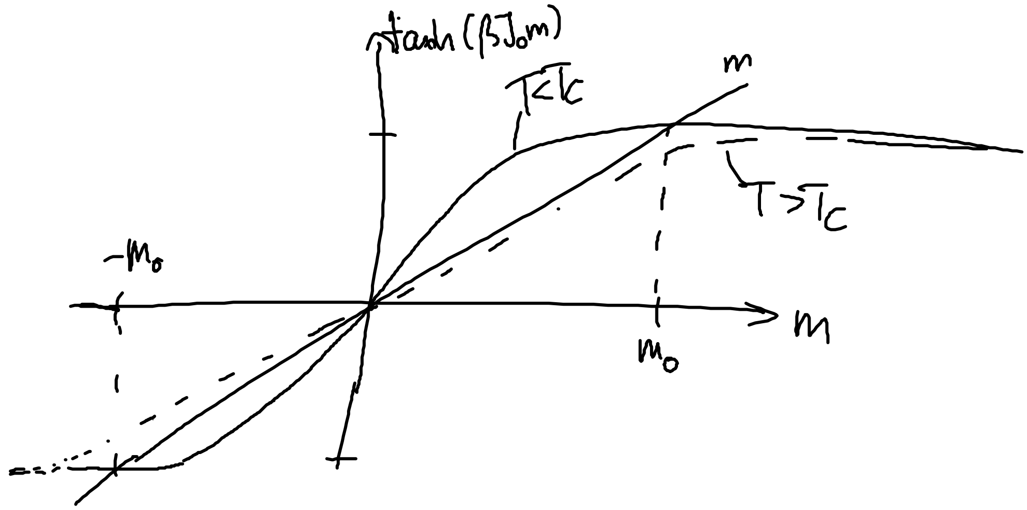
jetzt: $J_{ij} = J_0 / N \,, \quad h_i = h$

$$\Rightarrow m_i = m$$

$$m = \tanh\left(\beta \frac{J_0}{N} \sum_i m + \beta h\right)$$

$$\Leftrightarrow \boxed{m = \tanh(\beta J_0 m + \beta h)}$$ Selbstkonsistenzgl. für die Magnetisierung pro Gitterplatz

betrachte den Fall $h = 0$



qualitativ!

Es gibt also eine kritische Temperatur T_C

$T > T_C$: nur ein Schnittpunkt bei $m=0$ „paramagnet. Phase"

$T < T_C$: drei Schnittpunkte bei $m=0, \pm m_0$ „ferromagnet. Phase"

Festlegung von T_C :

Taylorentwicklung der rechten Seite der Selbstkonsistenzgleichung um T_C, d.h. für kleine m !

$m = \tanh(\beta J m)$

benutze $\tanh x \approx x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{15}x^5 + \mathcal{O}(x^7)$

$$\Rightarrow \quad m \approx \overbrace{\beta J m}^{x} - \frac{1}{3}(\beta J m)^3 + \dots \qquad \Big| :m$$

breche hier ab

Annahme: $m \neq 0$!

$$1 \approx \beta J - \frac{1}{3}(\beta J)^3 m^2$$

$$\Longleftrightarrow m^2 \approx 3(\beta J)^{-3}(\beta J - 1)$$

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

gilt für die von Null verschiedenen Lösungen!

man sieht: Wechsel des Verhaltens bei $\beta J = 1$

Führe ein: $\frac{J}{k_B T_C} = 1 \Longleftrightarrow T_C = \frac{J}{k_B} \quad \Rightarrow \beta J = \frac{J}{k_B T} = \frac{T_C}{T}$

~~E~~insetzen in die Gl. für m^2

$$\Rightarrow m^2 = 3\left(\frac{T}{T_C}\right)^3 \left(\frac{T_C}{T} - 1\right)$$

$$= 3\left(\frac{T}{T_C}\right)^3 \left(\frac{T_C - T}{T}\right) = 3\frac{T^2}{T_C^2} \underbrace{\left(\frac{T_C - T}{T_C}\right)}_{(-\varepsilon)}$$

führe $\varepsilon = \frac{T - T_C}{T_C}$

der Term $\sim(-\varepsilon)$ in m^2 bestimmt in erster Näherung! die Temperaturabhängigkeit!

denn:

$$\frac{T}{T_C} = \frac{T - T_C}{T_C} + \frac{T_C}{T_C} = \varepsilon + 1$$

$$\Rightarrow \left(\frac{T}{T_C}\right)^2 = 1 + 2\varepsilon + \varepsilon^2 \approx 1 \quad \text{für } \varepsilon \ll 1$$

$$\Rightarrow m^2 \approx 3\,(-\varepsilon)$$

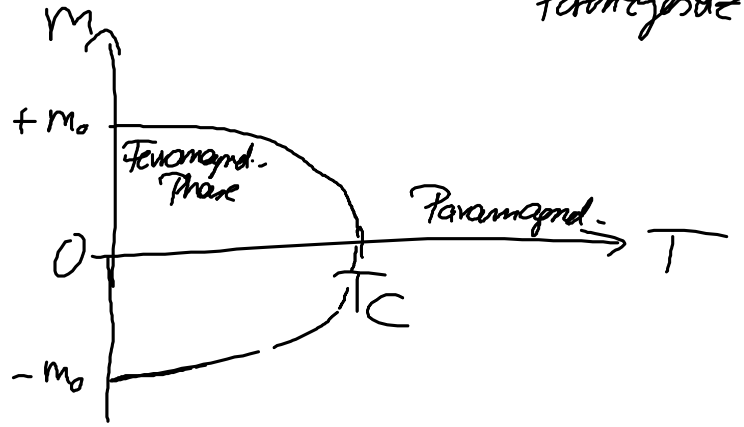
$\Rightarrow$ Spontane Magnetisierung:

$$m_0 = \pm\sqrt{3}\sqrt{-\varepsilon}$$

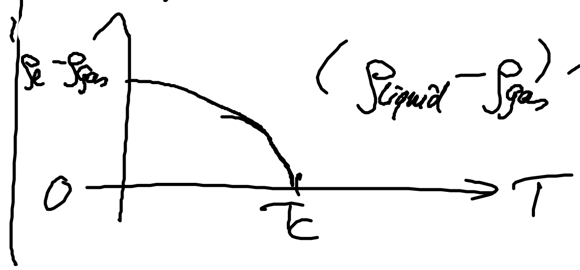
$\Longleftrightarrow m_0 \sim (-\varepsilon)^{\beta}$ mit $\boxed{\beta = \frac{1}{2}}$

Potenzgesetz!

Meanfield-Wert für den Exponenten!



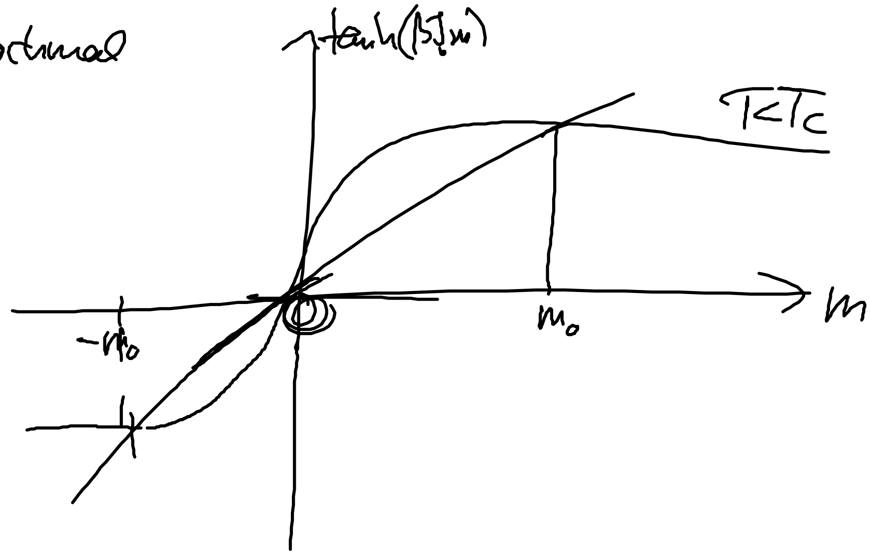
Analogie zum Van-der-Waals-Gas!



$(\rho_{liquid} - \rho_{gas}) \sim (-\varepsilon)^{\beta}$

$\beta = \frac{1}{2}$

betrachte nochmal



Frage: Wie findet man generell heraus, welche Lösungen (der Selbstkonsistenzgleichung) stabil sind bzw. instabil?

2 Möglichkeiten

a) direkt über die Freie Energie

b) über die Suszeptibilität

zu a) Freie Energie des infinite-range Ising-Modells:

$$\beta F = -\ln Z_N \approx S(\{H_i\})\Big|_{\{H_i\}=\{\bar{H}_i\}}$$

Sattelpunktsnäherung

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

benutze $$\bar{H}_i = \sum_k \beta J_{ik} m_k$$

$$\Rightarrow S\Big|_{\{\bar{H}_i\}} = \frac{1}{2\beta}\beta^2 \sum_{kl} J_{kl} m_k m_l - \sum_i \ln 2\cosh\left(\sum_k \beta J_{ik} m_k\right)$$

jetzt:

bei $h_i = 0$

$J_{kl} = \frac{J_0}{N}$, $m_k = m$

$$\Rightarrow S = N\left(\frac{\beta J_0}{2} m^2 - \ln 2\cosh(\beta J_0 m)\right)$$

$$\Rightarrow \frac{\beta F}{N} = \frac{\beta J_0}{2} m^2 - \ln 2\cosh(\overbrace{\beta J_0 m}^{x})$$

betrachte $\frac{\beta F}{N}$ dicht an T_C $\Rightarrow m$ klein

$\Rightarrow$ Taylorentwicklung des 2. Terms

$$\cosh x \approx 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \dots$$

$$\Rightarrow \frac{\beta F}{N} \approx \frac{\beta J_0}{2} m^2 - \ln 2 - \ln\left(1 + \frac{(\beta J_0 m)^2}{2} + \dots\right)$$

$$\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$$

$$\approx \frac{\beta J_0}{2} m^2 - \ln 2 - \frac{1}{2}(\beta J_0 m)^2 + \frac{1}{2}\frac{1}{4}(\beta J_0 m)^4 - \dots$$

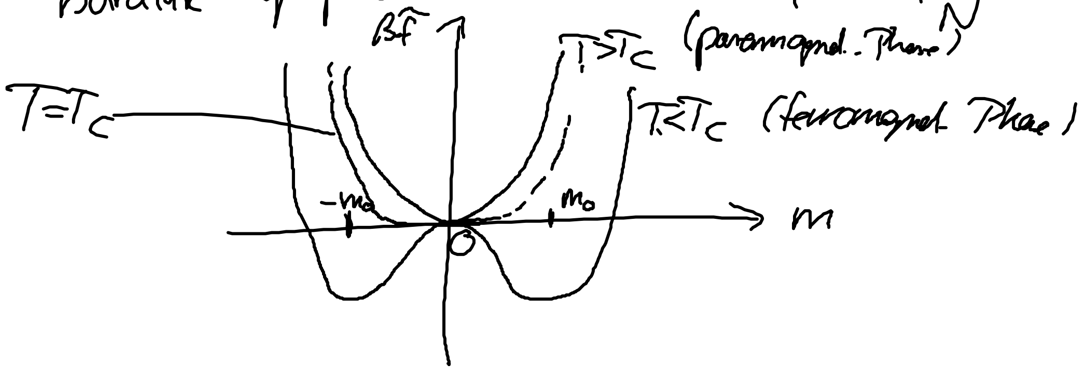
vernachlässige höhere Terme

$$\frac{\beta F}{N} = \frac{1}{2} m^2 \underbrace{\beta J_0 (1-\beta J_0)}_{\left(\frac{T_c}{T}\right)^2 \cdot \frac{T-T_c}{T_c}} + \frac{1}{8}(\beta J_0)^4 m^4 - \ln 2$$

Wir haben hier also die freie Energie entwickelt nach Potenzen des Ordnungsparameters!

(„Landau-Entwicklung")

betrachte graphisch die Funktion $\beta f = \frac{\beta F}{N} + \ln 2$



$T>T_c$: Es gibt nur ein Minimum, und zwar bei $m=0$!

$\rightarrow$ paramagnet. Fall

$T<T_c$: Es gibt 2 Minima bei $m=\pm m_0$

(das sind die stabilen Zustände!

- Das Extremum bei $m=0$ entspricht einem Maximum der freien Energie und ist somit instabil!