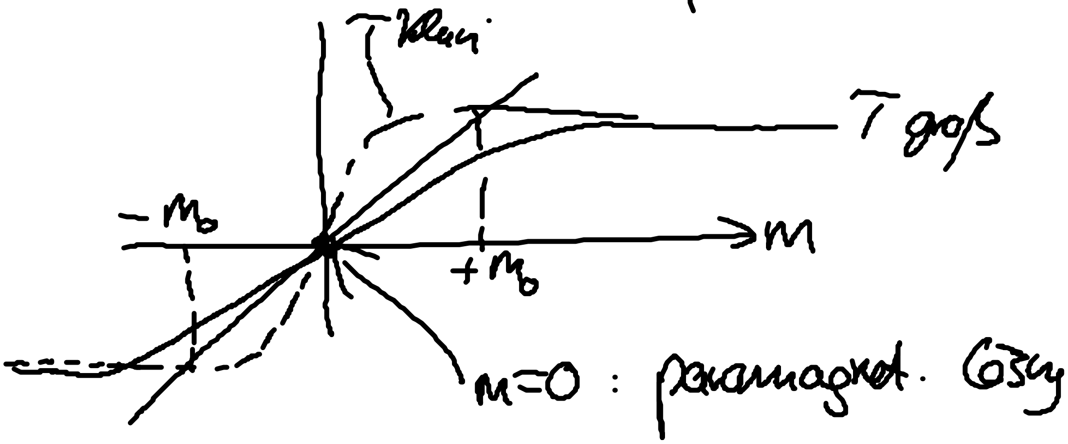
betrachte Ising Modell mit homogener Kopplung
(∞ Reichweite)

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{J}{N}S_iS_j$$

$\Rightarrow$ Magnetisierung $m = \langle S_i\rangle = \langle S\rangle$
$= \tanh(\beta J m)$ Selbstkonsistenzgleichung



Festlegung von T_c

$\Rightarrow$ entwickle die Selbstkonsistenzgleichung für kleine m

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

$$\Rightarrow m = \beta J m - \frac{1}{3}(\beta J m)^3 + \cancel{O((\beta J m)^5)}$$

dividiere durch m

(man sieht auch: Die paramagnet. Lösung $m=0$ ist immer Lösung!

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

$$\Leftrightarrow m^2 = 3(\beta J)^{-3}(\beta J - 1)$$

definiere:

$$\beta_c J = 1 \Leftrightarrow \frac{J}{k_B T_c} = 1$$

$$\Leftrightarrow T_c = J/k_B \quad | \cdot \beta$$

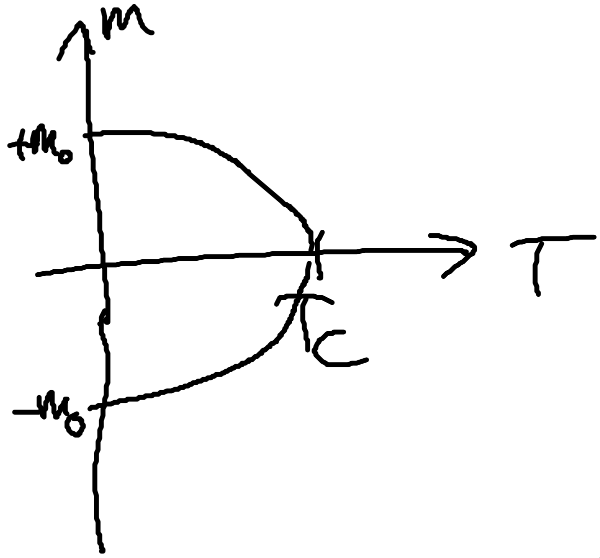
$$\beta J = \frac{T_c}{T}$$ einsetzen in die Entwicklung:

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

$$= 3\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)$$

spontane Magnetisierung für $T < T_c$

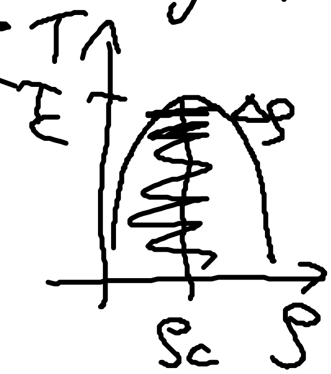
$$m_0 = \pm\sqrt{3}\,(\beta J)^{-1}\sqrt{\frac{T_c - T}{T_c}}$$



$$m_0 \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^\beta$$

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

wie beim van-der-Waals-Gas!



nicht überraschend, da in jedem Fall Molekularfeld-Theorie!

Stabilität der Lösungen?
hier: anhand Betrachtung der Freien Energie

zurück zum Variationsfunktional

$$F \le \tilde{\Phi} \leftarrow \text{optimiertes Variationsfunktional}$$

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

$$= \dots = -\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} \langle S_i\rangle_0 \langle S_j\rangle_0 - \sum_i \langle S_i\rangle_0 h_i - k_B T \sum_i \ln Z_{0,i}$$

optimiert: $\tilde{h}_i = -\sum_j J_{ij} \langle s_j \rangle_0 = +Jm$ $\quad \boxed{H_0 = \sum_i s_i h_i}$

spezialisiere auf ∞ langreichweitiges Modell

$$J_{ij} = \frac{J}{N}, \quad \langle s_i \rangle_0 = m \quad \text{(Translationsinvarianz)}$$

$$\tilde{\Phi} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \frac{J}{N} m^2 - \sum_i m(-Jm) - k_B T \sum_{i=1}^{N} \ln Z_0$$

$$\frac{\beta\tilde{\Phi}}{N} = -\frac{1}{2}\beta J m^2 + \beta J m^2 - \ln Z_0 \quad \text{mit } Z_0 = \sum_{s_i=\pm 1} e^{-\beta s_i \tilde{h}_i} = e^{\beta J m} + e^{-\beta J m} = 2\cosh(\beta J m)$$

$\Rightarrow$ Abschätzung der Freien Energie (MF)

$$\beta f^{MF} = \frac{\beta\tilde{\Phi}}{N} = +\frac{1}{2}\beta J m^2 - \ln 2\cosh(\beta J m)$$

Freie Energie pro Teilchen

entwickle βf^{MF} für kleine m

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

$$\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$$

$$\beta f^{MF} = \frac{\beta J}{2} m^2 - \ln 2 - \ln\Big(1 + \underbrace{\frac{1}{2}(\beta J m)^2 + \dots}_{x}\Big)$$

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

$$\beta f^{MF} \approx \frac{1}{2} m^2 \left(\beta J - (\beta J)^2\right) + \frac{1}{8} (\beta J)^4 m^4 - \ln 2$$

Entwicklung gilt nur für kleine m, d.h. dicht am krit. Punkt!

$$\beta J = \frac{T_c}{T}$$

$$\beta f^{MF} = \frac{m^2}{2} \underbrace{\frac{T_c}{T}\left(1 - \frac{T_c}{T}\right)}_{\left(\frac{T_c}{T}\right)^2 \left(\frac{T - T_c}{T_c}\right)} + \frac{1}{8} (\beta J)^4 m^4 - \ln 2$$

Term $\sim m^2$ wechselt bei $T = T_c$ sein Vorzeichen!

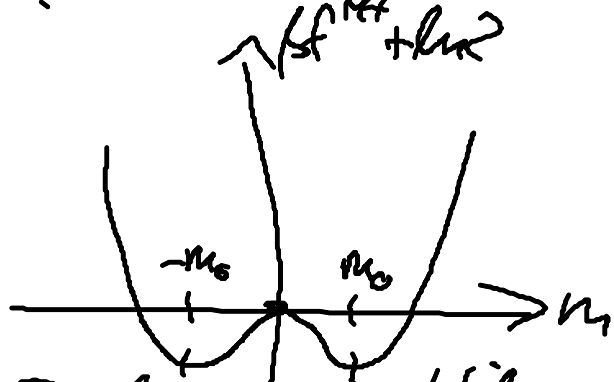
man sieht außerdem

$m = 0 \Rightarrow \beta f^{MF} = -\ln 2$ unabhängig von T

für $T<T_C$ wird der erste Term ($\sim m^2$) negativ!

aber: der Term $\sim m^4$ bleibt positiv und dominiert für große m!

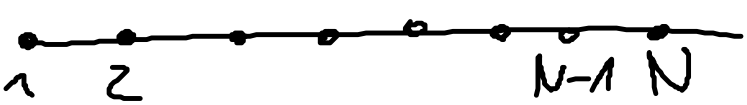
paramagnet. Lösung stabil



Doppelminimum, stabile Lösung $\pm m_0$, paramagnet. Lösung instabil!

III.6: Ising-Modell: Exakte Lösung in 1 Dimension

1-dimensionales Gitter: "Kette" mit N Plätzen



"geschlossene Ising-Kette"
$\Longleftrightarrow$ Ising Kette mit periodische Randbedingungen

$$S_{N+1} = S_1$$

Vorteil: alle Plätze sind equivalent (Translations-Invarianz)

$$\Longrightarrow \langle S_1 \rangle = \langle S_2 \rangle \dots \langle S_N \rangle = m$$

(dagegen "offene Kette":
Randeffekte $\longrightarrow$ Brechung der Translationssymmetrie!

Kanonische Zustandssumme

$$Z_K = \sum_{\{S\}} e^{-\beta H} \quad \text{mit} \quad H = -J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} - h \sum_{i=1}^{N} S_i$$

$$= \sum_{\{S\}} e^{\beta J \sum_i S_i S_{i+1} + \beta h \sum_{i=1}^{N} S_i}$$

$$= \sum_{\{S\}} e^{\beta J S_1 S_2 + \beta h S_1 + \beta J S_2 S_3 + \beta J S_2 + \dots + \beta J S_N S_1 + \beta h S_N}$$

führe ein

$$\tilde{V}(s_\alpha, s_\beta) = e^{\beta J s_\alpha s_\beta + \frac{\beta h}{2}(s_\alpha + s_\beta)}$$

$\alpha, \beta = 1, \dots, N$, $\tilde{V}(s_\alpha, s_\beta) = \tilde{V}(s_\beta, s_\alpha)$

Zustandssumme:

$$Z_K = \sum_{\{s\}} \tilde{V}(s_1, s_2)\, \tilde{V}(s_2, s_3) \dots \tilde{V}(s_{N-1}, s_N)\, \tilde{V}(s_N, s_1)$$

beachte $s_\alpha = \pm 1$, $s_\beta = \pm 1$ $\Rightarrow$ $\tilde{V}$ kann 4 Werte annehmen!

$\Rightarrow$ führe ein $\underline{\underline{V}} = \begin{pmatrix} \tilde{V}(1,1) & \tilde{V}(1,-1) \\ \tilde{V}(-1,1) & \tilde{V}(-1,-1) \end{pmatrix}$

„Transfer-Matrix"

Dann kann man schreiben:

$$Z_K = \sum_{\{S\}} \hat{V}(s_1, s_2) \dots \hat{V}(s_N, s_1)$$

$$= \sum_{s_1=\pm 1} \underbrace{\sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \hat{V}(s_1, s_2) \dots \hat{V}(s_N, s_1)}_{\underline{\underline{V}}^N}$$

$$= \operatorname{Tr} \underline{\underline{V}}^N$$

Zeige das am Fall $N=2$

$$\sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \hat{V}(s_1, s_2) \hat{V}(s_2, s_1)$$

$$\hat{V}(s_\alpha, s_\beta) = e^{\beta J s_\alpha s_\beta + \frac{\beta h}{2}(s_\alpha + s_\beta)}$$

$$\Rightarrow \sum_{s_1} \sum_{s_2} \hat{V}(s_1, s_2) \hat{V}(s_2, s_1) = Z_K^{N=2}$$

$$= \underbrace{e^{\beta J + \beta h} e^{\beta J + \beta h}} + \underbrace{e^{\beta J - \beta h} e^{\beta J - \beta h}}$$

$s_1 = s_2 = 1$ $\qquad$ $s_1 = s_2 = -1$

$$+ e^{-\beta J + \frac{\beta h}{2}(+1-1)} \quad e^{-\beta J + \frac{\beta h}{2}(+1+1)}$$

$s_1 = 1$
$s_2 = -1$

$$+ e^{-\beta J + \frac{\beta h}{2}(-1+1)} \quad e^{-\beta J + \frac{\beta h}{2}(+1-1)}$$

$$= \left(e^{\beta J + \beta h}\right)^2 + \left(e^{\beta J - \beta h}\right)^2 + 2\left(e^{-\beta J}\right)^2 \qquad (1)$$

anderseits

$$\underline{\underline{V}} = \begin{pmatrix} \hat{V}(1,1) & \hat{V}(1,-1) \\ \hat{V}(-1,1) & \hat{V}(-1,-1) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} e^{\beta J + h} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - h} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{V}}^2 = \left(\begin{array}{c|c} \left(e^{\beta J + \beta h}\right)^2 + \left(e^{-\beta J}\right)^2 & e^{\beta J + \beta h} e^{-\beta J} + e^{-\beta J} e^{\beta J - \beta h} \\ \hline e^{-\beta J} e^{\beta J + \beta h} + e^{\beta J - \beta h} e^{-\beta J} & \left(e^{-\beta J}\right)^2 + \left(e^{\beta J - \beta h}\right)^2 \end{array}\right)$$

$$\Rightarrow \mathrm{Tr}\, \underline{\underline{V}}^2 = \left(e^{\beta J + \beta h}\right)^2 + \left(e^{\beta J - \beta h}\right)^2 + 2\left(e^{-\beta J}\right)^2$$

$$= (1)$$

$\Rightarrow$ das heißt

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, \underline{\underline{V}}^N \quad \text{ist richtig!}$$

Multiplikation mit $\underline{\underline{V}}$ $\Leftrightarrow$ Summation über die Konfiguration eines Spins!

$\Rightarrow$ Transfer-Matrix!

Freie Energie

$$F = -k_B T \ln Z_N$$

Trick: Diagonalisiere die Matrix $\underline{\underline{V}}$

d.h. $\underline{\underline{V}} = \underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}}^{-1}$

$$\underline{\underline{V}}\, \underline{x}_1 = \lambda_1 \underline{x}_1$$

$$\underline{\underline{V}}\, \underline{x}_2 = \lambda_2 \underline{x}_2$$

$$\underline{\underline{A}}\, \underline{\underline{A}}^{-1} = \underline{\underline{1}}$$

$$Z_N = \mathrm{Tr}\, \underline{\underline{V}}^N = \mathrm{Tr} \left(\underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \underline{\underline{A}}^{-1} \right)^N$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\underline{\underline{A}} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N \underline{\underline{A}}^{-1} \right)$$ nutze zykl. Invarianz der Spur

$$= \mathrm{Tr}\left(\underbrace{\underline{\underline{A}}^{-1} \underline{\underline{A}}}_{\underline{\underline{1}}} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N \right)$$

$$Z_N = \mathrm{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \mathrm{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

in unserem Fall:

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \cosh \beta h \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta h + e^{-2\beta J}}$$