

Wk:

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

Molekularfeldnäherung:

$$\begin{aligned} \hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j &= (\langle \hat{\underline{J}}_i \rangle + \overset{\text{Abweichung}}{\delta \underline{J}_i}) (\langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \delta \underline{J}_j) \\ &\approx \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \delta \underline{J}_i \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \delta \underline{J}_j \\ &\quad + \cancel{\delta \underline{J}_i \delta \underline{J}_j} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{aligned} \hat{H}^{\text{MF}} &= \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^N \hat{\underline{J}}_i \cdot \underline{B}_i^{\text{eff}} = - \sum_{i=1}^N \hat{\mu}_i \cdot \underline{B}_i^{\text{eff}} && \text{Erdbeobachtung-} \\ & && \text{Skizze} \\ \text{mit } \underline{B}_i^{\text{eff}} &= -\frac{\hbar}{g\mu_B} \sum_{j \neq i} J_{ij} \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \underline{B}_0 \end{aligned} \right.$$

Jetzt Vergleich was wie beim reinen Paramagneten!

$$\underline{B}_0 = B_0 \hat{e}_z$$

$$\Rightarrow \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle \sim \hat{e}_z$$

$$\Rightarrow \underline{B}_i^{\text{eff}} \sim \hat{e}_z$$

nehme weiter an:

$$J_{ij} = \frac{J_0}{N}$$

„homogene Kopplung“

$$\Rightarrow \langle \hat{j}_i \rangle = \langle \hat{j}_z \rangle \hat{e}_z$$

unabhängig vom Teilchenindex!

$$\Rightarrow \underline{B}_i^{\text{eff}} = -\frac{\hbar}{g\mu_B} \sum_{i=1}^N \frac{J_0}{N} \langle \hat{j}_z \rangle \hat{e}_z + B_0 \hat{e}_z = -\frac{\hbar}{g\mu_B} J_0 \langle \hat{j}_z \rangle \hat{e}_z + B_0 \hat{e}_z$$

Einsetzen in den Hamiltonian

$$\hat{H}^{\text{MF}} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^N \hat{j}_{i,z} \cdot \underline{B}_z^{\text{eff}}$$

$$\left(-\frac{\hbar}{g\mu_B} J_0 \langle \hat{j}_z \rangle + B_0 \right)$$

hat genau dieselbe Struktur wie beim reinen Paramagneten!

Schreibe das effektive Feld noch etwas um:

betrachte dazu die Magnetisierung pro Teilchen

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \hat{\mu}_{i,z} \right\rangle = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \frac{1}{N} \left\langle \underbrace{\sum_{i=1}^N \hat{j}_{i,z}}_{N \langle \hat{j}_z \rangle} \right\rangle$$

$$= -\frac{g\mu_B}{\hbar} \langle \hat{j}_z \rangle$$

$$\Rightarrow -\langle \hat{j}_z \rangle = \frac{\hbar}{g\mu_B} m$$

$$\Rightarrow \underline{B}_z^{\text{eff}} = \lambda m + B_0$$

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

man sieht: Meanfield-Beitrag zum effektiven Feld ist
 proportional zur Magnetisierung!

benutze unsere Ergebnisse zum nahen Paramagneten

$$\Rightarrow m = \frac{M}{N} = g \mu_B J B_f \left(\beta g \mu_B J (\lambda m + B_0) \right)$$

mit $B_f(x)$: Brillouin-Funktion

analog zum früheren Ergebnis, außer daß es sich jetzt um eine
 implizite Gleichung für m handelt! \Rightarrow Selbstkonsistenzgleichung!

III.5. Alternative Herleitung der Meanfieldnäherung:

Hubbard-Schattendick-Transformation

betrachte dazu das
 Ising-Modell

$$H = - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} J_{ij} S_i S_j - \sum_{i=1}^N h_i S_i \quad \left(\begin{array}{l} \text{Kopplungs-} \\ \text{matrix} \end{array} \right) \quad \left(\begin{array}{l} \text{lokales externes Feld} \\ \text{klass.} \\ \text{Schreibweise} \end{array} \right)$$

mit $S_i = \pm 1$

Betrachte kanonische Zustandssumme

$$Z_N = \text{Tr} e^{-\beta H}$$

$$= \sum_{S_1 = \pm 1} \sum_{S_2 = \pm 1} \dots \sum_{S_N = \pm 1} e$$

$$\beta \left[\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j + \sum_i h_i S_i \right]$$

benutze nun verallgemeinerte Gauß'sche Integrale:

man weiß:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2 + \beta x} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\beta^2/4\alpha}$$

1-dimensional
Gauß-Integral

Verallgemeinerung auf quadratische Form

$$\int dx_1 \dots \int dx_N e^{-\sum_{i,j} x_i A_{ij} x_j + \sum_i x_i B_i} = \frac{\sqrt{\pi}^N}{\sqrt{\det A}} e^{\frac{1}{4} \sum_{i,j} B_i (A^{-1})_{ij} B_j}$$

Matrix

Verwende diese (exakte) Relation für den Term

$$e^{\beta/2 \sum_{ij} S_i J_{ij} S_j} \text{ in der Zustandssumme des Ising-Modells!}$$

d.h. $\frac{1}{4} (A^{-1})_{ij} \stackrel{!}{=} \beta/2 J_{ij}$

$$\Rightarrow A_{ij} = \frac{1}{2\beta} (J^{-1})_{ij}$$

$$\Rightarrow e^{\beta/2 \sum_{ij} S_i J_{ij} S_j} = \frac{1}{\sqrt{\pi}^N} \sqrt{\frac{1}{2\beta} \det(J^{-1})}$$

$$\int dH_1 \int dH_2 \dots \int dH_N \left(e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j} \cdot e^{\sum_i H_i S_i} \right)$$

Einssetzen in den Ausdruck für die Zustandssumme:

$$Z_N = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \frac{1}{(\sqrt{\pi})^N} \frac{1}{\sqrt{2\beta \det J}} \cdot \int dH_1 \dots \int dH_N e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j + \sum_i s_i H_i + \beta \sum_i s_i h_i}$$

$\underbrace{\sum_i s_i (H_i + \beta h_i)}$

Bemerkungen

- Die bisher gemachte Transformation ist exakt, sie heißt „Hubbard - Stratonovich - Transformation“
- Spin-Variable s_i taucht nur noch linear im Exponenten auf!
- aber: Zusätzlich zum externen Feld h_i wird jetzt auf jedem Spin ein „Hilfsfeld“ H_i
 - diese sind gekoppelt über $\sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j$
 - ~~aber die erste~~ Exponentenfunktion!

Weiteres Vorgehen:

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

$\sum_{s_1} \dots \sum_{s_N} e^{\dots}$ mit $s_i = \pm 1$

benutze:

$$\sum_{s_1} \dots \sum_{s_N} e^{\sum_i s_i (H_i + \beta h_i)}$$

$$= \left(e^{H_1 + \beta h_1} + e^{-(H_1 + \beta h_1)} \right) \dots \left(e^{H_N + \beta h_N} + e^{-(H_N + \beta h_N)} \right)$$

$$= \prod_{i=1}^N \underbrace{2 \cosh(H_i + \beta h_i)}_{z_i} = z_0$$

↑
Zustandssumme für
einen Ising-Spin
im Feld $H_i + \beta h_i$

↑
Zustandssumme des
Systems aus nicht-
wechselwirkenden
Spins

beachte: $z_0 = z_0(H_1, \dots, H_N) = z_0(dH)$

$$z_k = \frac{1}{(2\beta \det J)} \frac{1}{\sqrt{\pi}}^N \int dH_1 \dots \int dH_N \times e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j} z_0(dH)$$

Interpretation:

z_k ist eine „mittlere“ Zustandssumme:

Man mittelt die freie $z_0(dH)$ über die Hiltsfelder H_i ,
wobei diese gerade gaußverteilt sind!

Schreibe z_k noch etwas um:

$$z_k = \frac{1}{\sqrt{2\beta \det J}} \frac{1}{\sqrt{\pi}}^N \int dH_1 \dots \int dH_N e^{-S(dH)} \underbrace{\prod_{i=1}^N 2 \cosh(H_i + \beta h_i)}_{\sum \ln 2 \cosh(H_i + \beta h_i)}$$

mit $S = \frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j - \ln z_0$

Bis hierhin war alles exakt!

Molekularfeldnäherung: approximiere das verbleibende Integral (d.h. das Integral über die Hilfsfelder)

benutze dazu die Sattelpunktmethode

↓
 ersetze das Integral (mit Vorfaktoren)
 durch den Wert des Integranden am Maximum

⇔ Minimum der Funktion $S(\{H_i\})$

Bestimme das Minimum:

$$\frac{\partial S}{\partial H_i} \stackrel{!}{=} 0 \quad \forall H_i$$

mit $\frac{\partial S}{\partial H_i} = \frac{1}{2\beta} \sum_{j=1}^N (\underline{J}^{-1})_{ij} H_j \cdot 2 - \frac{2 \sinh(H_i + \beta h_i)}{2 \cosh(H_i + 2\beta h_i)} \stackrel{!}{=} 0$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\beta} \sum_j (\underline{J}^{-1})_{ij} H_j - \tanh(H_i + \beta h_i) \stackrel{!}{=} 0$$

Summiere ganze Gleichung $\sum_i J_{ik}$

$$\Rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_i \sum_j \underbrace{J_{ik} (\underline{J}^{-1})_{ij}}_{J_{ki} (\underline{J}^{-1})_{ij}} H_j - \sum_i J_{ik} \tanh(H_i + \beta h_i) = 0$$

benutze: $\sum_i J_{ki} (\underline{J}^{-1})_{ij} = \delta_{kj}$

$$\Rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_j \delta_{kj} H_j - \sum_i J_{ik} \tanh(H_i + \beta h_i) = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\beta H_k = \sum_i J_{ik} \tanh(H_i + \beta h_i)}$$

Extremumsbedingung für die H_i 's!