Wh:

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

Molekularfeldnäherung:

$$\hat{\underline{J}}_i \cdot \hat{\underline{J}}_j = \Big(\langle \hat{\underline{J}}_i \rangle + \underbrace{\delta \hat{\underline{J}}_i}_{\text{Abweichung}} \Big) \Big(\langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \delta \hat{\underline{J}}_j \Big)$$

$$\approx \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \delta \hat{\underline{J}}_i \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \langle \hat{\underline{J}}_i \rangle \delta \hat{\underline{J}}_j \cancel{+ \delta \hat{\underline{J}}_i \cdot \delta \hat{\underline{J}}_j}$$

$$\Rightarrow \quad \hat{H}^{MF} = \frac{g \mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{J}}_i \cdot \underline{B}_i^{eff} = -\sum_{i=1}^{N} \hat{\underline{\mu}}_i \cdot \underline{B}_i^{eff}$$

Einteilchen-Struktur

mit $\quad \underline{B}_i^{eff} = -\frac{\hbar}{g \mu_B} \sum_{j=1}^{N} J_{ij} \langle \hat{\underline{J}}_j \rangle + \underline{B}_0$

Jetzt Vorgehensweise wie beim realen Paramagneten!

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

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

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

nehme weiter an: $\quad J_{ij} = \frac{J_0}{N} \quad$ „homogene Kopplung“

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

unabhängig vom Teilchenindex!

$$\Rightarrow B_i^{eff} = -\frac{\hbar}{g\mu_B} \sum_{j=1}^{N} \frac{J_0}{N} \langle \hat{J}_z \rangle \hat{e}_z + B_0 \hat{e}_z = -\frac{\hbar}{g\mu_B} J_0 \langle \hat{J}_z \rangle \hat{e}_z + B_0 \hat{e}_z$$

<u>Einsetzen in den Hamiltonian</u>

$$\hat{H}^{MF} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \hat{J}_{i,z} \cdot \underbrace{B_z^{eff}}_{\left(-\frac{\hbar}{g\mu_B} J_0 \langle \hat{J}_z \rangle + B_0\right)}$$

hat genau dieselbe Struktur wie beim reinen Paramagneten!

Schreibe das effektive Feld noch etwas um:

betrachte dazu die Magnetisierung pro Teilchen

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

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

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

$$\Rightarrow \boxed{B_z^{eff} = \lambda m + B_0}$$

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

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

benutze unsere Ergebnisse zum reinen Paramagneten

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

mit $B_J(x)$: Brillouin-Funktion

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

II.5. Alternative Herleitung der Meanfieldnäherung: Hubbard-Stratonovich-Transformation

betrachte dazu das

Ising-Modell

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} \underbrace{J_{ij}}_{\text{Kopplungsmatrix}} s_i s_j - \sum_{i=1}^{N} \underbrace{h_i}_{\text{lokales externes Feld}} s_i$$

(klass. Spinsystem!)

mit $s_i = \pm 1$

Betrachte kanonische Zustandssumme

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

$$= \sum_{s_1=\pm 1}\sum_{s_2=\pm 1}\cdots\sum_{s_N=\pm 1} e^{\frac{\beta}{2}\sum_{ij} J_{ij}s_is_j + \beta\sum_i h_i s_i}$$

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-dimensionales Gaußintegral

Verallgemeinerung auf quadratische Form

$$\int dx_1 \ldots \int dx_N\, e^{-\sum_{ij} x_i \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Matrix}}}{A_{ij}} x_j + \sum_i x_i B_i} = \frac{\sqrt{\pi}^N}{\sqrt{\det A}}\, e^{\frac{1}{4}\sum_{ij} B_i (A^{-1})_{ij} B_j}$$

Verwende diese (exakte) Relation für den Term

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

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

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

$$\Rightarrow e^{\beta/2 \sum_{ij} s_i J_{ij} s_j} = \frac{1}{\sqrt{\pi}^N} \sqrt{\frac{1}{2\beta} \det(\underline{J}^{-1})} \cdot \int dH_1 \int dH_2 \ldots \int dH_N \left(e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j} \cdot e^{\sum_i H_i s_i} \right)$$

Einsetzen in den Ausdruck für die Zustandssumme:

$$Z_N = \sum_{S_1=\pm1}\sum_{S_2=\pm1}\cdots\sum_{S_N=\pm1} \frac{1}{\sqrt{\pi}^N}\frac{1}{\sqrt{2\beta\det\underline{\underline{J}}}}\cdot\int dH_1\cdots\int dH_N \; e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij}H_i(J^{-1})_{ij}H_j+\underbrace{\sum_i S_iH_i+\beta\sum_i S_ih_i}_{\sum_i S_i(H_i+\beta h_i)}}$$

<u>Bemerkungen</u>

- Die bisher gemachte Transformation ist <u>exakt</u>; sie heißt „Hubbard-Stratonovich-Transformation".

- Spin-Variable S_i taucht nur noch <u>linear</u> im Exponenten auf!

- aber: Zusätzlich ~~zum~~ externen Feld h_i wirkt jetzt auf jeden Spin ein „Hilfsfeld" H_i

  – diese sind gekoppelt über ~~den~~ die erste Exponentialfunktion!

Weiteres Vorgehen:

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{\pi}^N}\frac{1}{\sqrt{2\beta\det\underline{\underline{J}}}}\int dH_1\cdots\int dH_N\; e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{ij}H_i(J^{-1})_{ij}H_j}\cdot\sum_{S_1}\cdots\sum_{S_N} e^{\sum_i S_i(H_i+\beta h_i)}$$

$\boxed{\text{mit } S_i=\pm1}$

benutze:

$$\sum_{S_1}\cdots\sum_{S_N} e^{\sum_i S_i(H_i+\beta h_i)}$$

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

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

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

Zustandssumme des Systems aus nicht-wechselwirkenden Spins

beachte: $Z_0 = Z_0(H_1, \dots, H_N) = Z_0(\{H\})$

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

Interpretation:

Z_K ist eine „mittlere" Zustandssumme:

Man mittelt die Größe $Z_0(\{H\})$ über die Hilfsfelder H_i, wobei diese gerade gaußverteilt sind!

schreibe Z_K noch etwas um:

$$Z_K = \frac{1}{\sqrt{2\beta \det \underline{\underline{J}}}} \frac{1}{\sqrt{\pi}^N} \int dH_1 \dots \int dH_N \, e^{-S(\{H\})}$$

mit $S = \frac{1}{2\beta} \sum_{ij} H_i (J^{-1})_{ij} H_j - \underbrace{\ln Z_0}_{\sum_{i=1}^{N} \ln 2\cosh(H_i + \beta h_i)}$

Bis hierhin war alles exakt!

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

benutze dazu die <u>Sattelpunktsmethode</u>

$\Downarrow$

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

$\Longleftrightarrow$ Minimum der Funktion $S(\{H\})$

Bestimme das Minimum:

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

$$\Longleftrightarrow \frac{1}{\beta}\sum_j (\underline{J}^{-1})_{ij} H_j - \tan(H_i+\beta h_i) \overset{!}{=} 0$$

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

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

$$\Longrightarrow \boxed{\beta^{-1} H_k = \sum_i J_{ik} \tanh(H_i + \beta h_i)}$$

Extremumsbedingung für die H_i's !