

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

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

$$= \sum_{s_1 = \pm 1} \dots \sum_{s_N = \pm 1} e^{\beta/2 \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j + \beta \sum_i h_i s_i}$$

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

Hubbard-Stratonovich-Transformation

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

$$\text{mit } z_0 = \prod_{i=1}^N 2 \cosh(H_i + \beta h_i)$$

$$Z_N = \frac{1}{\sqrt{\dots}} \int dH_1 \dots \int dH_N e^{-S(\underline{H}, \underline{z})}$$

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

$$- \sum_i \ln 2 \cosh(H_i + \beta h_i)$$

Sattelpunktsnäherung:

$$Z_N \approx e^{-S(\underline{H}^*, \underline{z})}$$

dabei sind \underline{H}^* die Hilffelder H_i , an denen S extremal wird!

$$\text{d.h. } \left. \frac{\partial S}{\partial H_i} \right|_{\{H_i\}} \stackrel{!}{=} 0$$

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

Interpretation ?

neue $Z_{SP} := e^{-S(\{H_i\})}$

↑
am Sattelpunkt

Free Energy: $F_{SP} = -k_B T \ln Z_{SP}$
 $= k_B T S(\{H_i\})$

Frage:
 Zusammenhang zw.
 den Hilfsfeldern H_i und
 der Physik des Systems?

betrachte Magnetisierung am Platz k :

$$m_k = \langle S_k \rangle = \frac{1}{Z_k} \text{Tr} S_k e^{-\beta H} \quad \text{mit } H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} s_i J_{ij} s_j - \sum_i h_i s_i$$

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

bis hierhin ist alles exakt!

$$= -\frac{\partial F}{\partial h_k}$$

benutze nun die Sattelpunktsnäherung:

$$F \rightarrow F^{SP} = k_B T S(\{H_i\})$$

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

Beach: Die H_i hängen von den h_i über die Extremwertbedingung ab!

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

$$\Rightarrow m_K = -k_B T \frac{\partial S}{\partial H_K} \Big|_{\{H_i\}} \frac{\partial H_K}{\partial H_K} - k_B T \frac{\partial}{\partial H_K} \sum_i \ln 2 \cosh(H_i + \beta h_i)$$

Null, da S bei $\{\bar{H}_i\}$ extremal wird!

$$\frac{2 \sinh(H_K + \beta h_K)}{2 \cosh(H_K + \beta h_K)}$$

Damit folgt:

$$m_K = \tanh(\bar{H}_K + \beta h_K) \quad (*)$$

benutze nun noch, dass:

$$\beta^{-1} \bar{H}_K = \sum_i J_{iK} \underbrace{\tanh(\bar{H}_i + \beta h_i)}_{m_i \text{ wegen } (*)}$$

\Rightarrow Insgesamt:

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

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

Spezialfall

„infinite-range“ Ising model

dh. unendliche langreichweitige Wechselwirkung

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

homogenes Feld

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

man findet:

$$S \sim N \quad !$$

Exakt ist die Zustandssumme nach der Hubbard-Stratonovich-Transformation!

↳ Für $N \rightarrow \infty$ (thermodyn. Limit) wird die Sattelpunktsnäherung exakt!

→ 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, Rüstigkeitssphäre) hat, und je länger die Reichweite der Wechselwirkung ist.

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

Ausgangspunkt: Gleichung für die ~~Mag~~ Magnetisierung

$$m_i = \tanh(\beta \sum_j J_{ij} m_j + \beta h_i) \quad \begin{array}{l} \text{allgemeine} \\ \text{Form} \end{array}$$

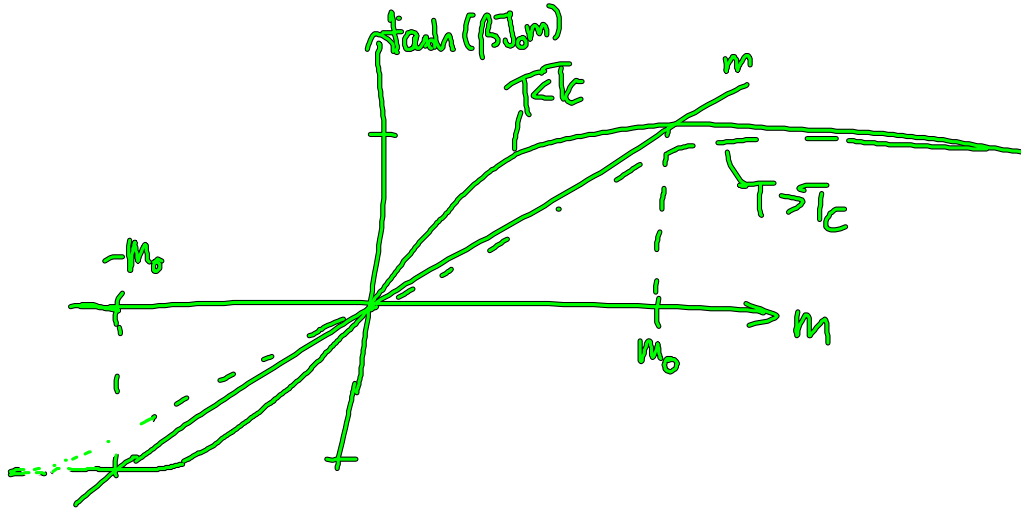
$$\text{jetzt: } J_{ij} = \frac{J_0}{N}, \quad h_i = h$$

$$\Rightarrow m_i = m$$

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

$$\Leftrightarrow \boxed{m = \tanh(\beta J_0 m + \beta h)} \quad \begin{array}{l} \text{Selbstkonsistenzgl.} \\ \text{für die Magnetisierung} \\ \text{pro Gitterplatz} \end{array}$$

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"

Bestimmung von T_c :

Taylorentwicklung des rechten Seits der Selbstkonsistenzgleichung um T_c , d.h. für kleine m !

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

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

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

breite hier ab

Annahme: $m \neq 0$!

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

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

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

gilt für die von Null
verschiedenen Lösungen!

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

$$\text{führe ein: } \frac{J}{k_B T_C} = 1 \Leftrightarrow T_C = \frac{J}{k_B} \Rightarrow \beta J = \frac{J}{k_B T} = \frac{T_C}{T}$$

Einsetzen in die G. für m^2

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

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

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

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

deut:

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

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

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

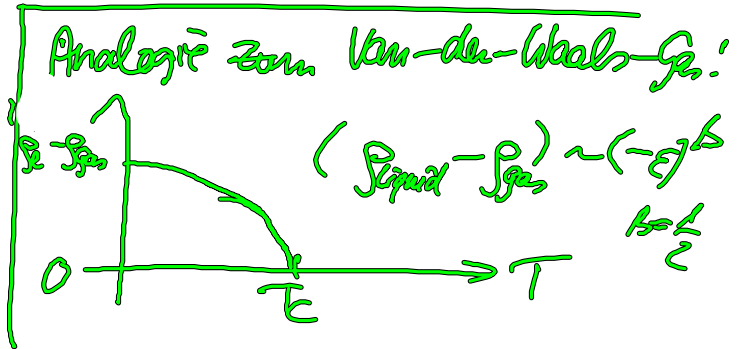
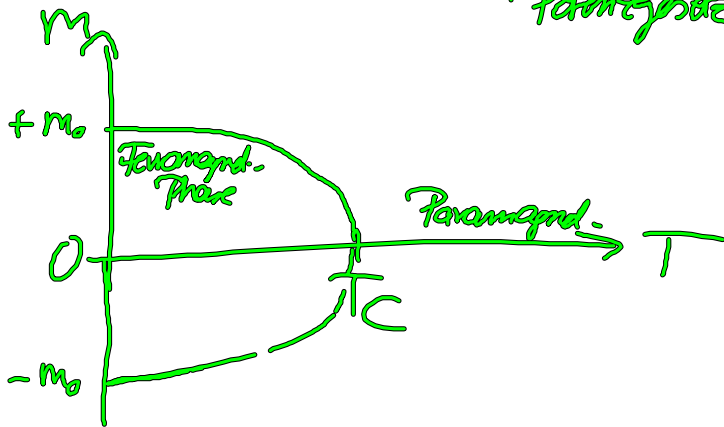
\Rightarrow Spontane Magnetisierung:

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

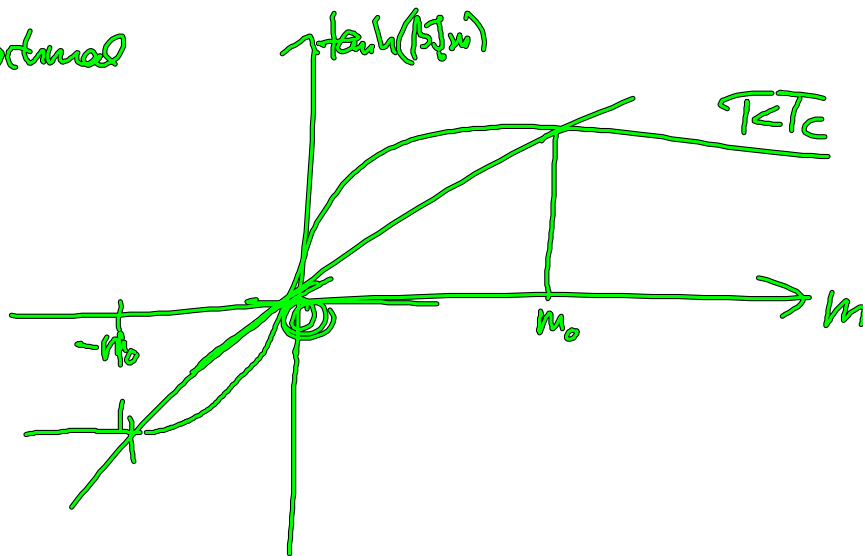
$\Leftrightarrow m_0 \sim (-\varepsilon)^\beta$ mit $\beta = \frac{1}{2}$

Parasymmetrie!

Meanfield-Wert für die Exponenten!



betrachte normal



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 Ising-Modells

$$\beta F = -\ln Z_H \approx S(\{H_i\}) \quad \{H_i\} = \{H\}$$

Sattelpunktsnäherung

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

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

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

gesetzt:

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

bei $h_i = 0$

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

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

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

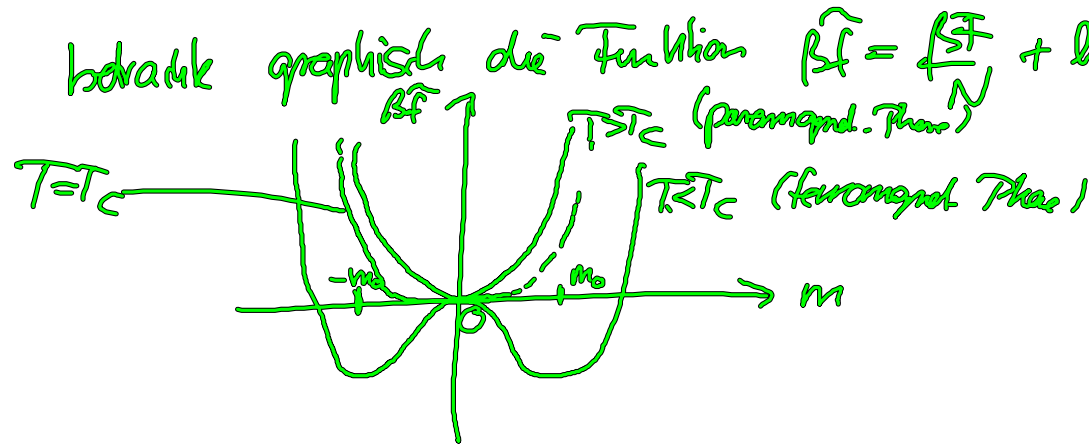
$$\frac{\beta F}{N} = \frac{1}{2} m^2 \beta J_0 (1 - \beta J_0) + \frac{1}{8} (\beta J_0)^4 m^4 - \ln 2$$

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

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

(„Landau-Entwicklung“)

Skizziere graphisch die Funktion $\hat{\beta F} = \frac{\beta F}{N} + \ln 2$



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

→ 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!

