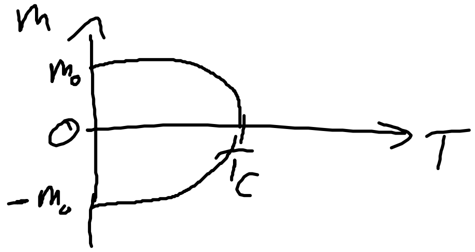
Wh: $m = \tanh(\beta J m)$ (im Fall $h=0$)

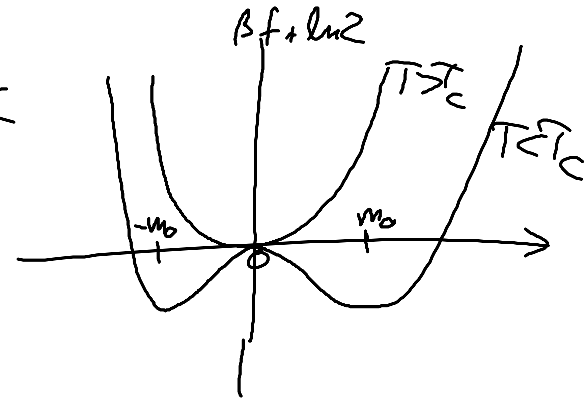


$$m_0 \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{\beta} \quad \text{mit } \beta = \frac{1}{2}$$

Stabilität der Lösungen, insbesondere $T<T_C$

betrachte dafür die freie Energie pro Teilchen

$$f = \frac{F}{N}$$



$\Rightarrow$ die Lösung mit $m=0$ ist für $T<T_C$ instabil

Alternativ: Betrachte die magnetische Suszeptibilität

$$\chi = \left.\frac{\partial m}{\partial h}\right|_{h=0} \qquad m = \tanh(\beta J m + \beta h)$$

Nullfeld-Suszeptibilität

man findet (siehe Übungszettel)

$$\chi = \frac{\beta}{\frac{1}{1-m^2} - \beta J} \quad (*) \quad \text{für } h=0$$

Fallunterscheidung

a) $T>T_C$

$\Rightarrow m=0 \overset{\text{aus } (*)}{\Longrightarrow} \chi = \frac{\beta}{1-\beta J}$

$$= \frac{1}{k_B T}\cdot\frac{1}{1-\frac{T_c}{T}}$$

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

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

$$= \frac{1}{k_B(T-T_C)}$$ positiv für $T > T_C$!

↓

Lösung mit $m=0$ ist thermodynamisch stabil !

außerdem:

$$\chi = k_B^{-1} \underbrace{(T-T_C)^{-\gamma}}_{\text{Potenzgesetz}} \quad \text{mit } \gamma = 1$$

Meanfield-Exponent

Die magnet. Suszeptibilität des unendlich langreichweitigen Ising-Modells verhält sich also genau wie die isotherme Kompressibilität im van-der-Waals-Modell für $T \to T_C$!

b) $T < T_C$

Erinnerung: Hier gibt es 3 Lösungen der Selbstkonsistenzgleichung, nämlich $m=0$
$m = \pm m_0$

paramagnet. Lösung $(m=0)$ ist instabil, denn

$$\chi\Big|_{m=0} = \frac{1}{k_B(T-T_C)} < 0 \quad \text{für } T < T_C$$

Widerspruch zur thermodyn. Aussage, daß Suszeptibilitäten immer positiv sein müssen !

außerdem:

es gilt $\chi \sim (\langle s^2 \rangle - \underbrace{\langle s \rangle}_{m}^2) \cdot N$

$$= \langle (s - \langle s \rangle)^2 \rangle \cdot N$$

muß positiv sein
(da man quadrat. Ausdruck mittelt)

betrachte nun die ferromagnet. Lösung $m = \pm m_0$

nach (*) $\chi = \dfrac{\beta}{\frac{1}{1-m_0^2} - \beta J} \implies$ Nenner $(1-m_0^2)^{-1} - \beta J \overset{!}{>} 0$

~~Zu~~ Zeige das für Temperaturen dicht unter $T_C \Rightarrow m_0$ klein

$$\frac{1}{1-m_0^2} \approx 1 + m_0^2$$

(folgt aus Taylorentwicklung)

betrachte also

$$1 + m_0^2 - \overbrace{\beta J}^{\frac{T_c}{T}}$$

benutze

$$m_0^2 = 3\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)$$

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

$$= \underbrace{\frac{T - T_c}{T}}_{\frac{T_c}{T}\Big(\underbrace{\frac{T-T_c}{T_c}}_{\varepsilon}\Big)} + 3\frac{T^2}{T_c^2}\underbrace{\frac{T_c - T}{T_c}}_{\varepsilon}$$

$$\frac{T}{T_c} = \underbrace{\overbrace{\frac{T-T_c}{T_c}}^{\varepsilon} + 1}_{\varepsilon + 1} \approx 1$$

$$\approx 2\,\frac{T_c - T}{T_c} > 0 \quad \text{für } T < T_C \;!$$

Beachte:
für $T \to 0 \Leftrightarrow m_0 \to \pm 1 \Longrightarrow \chi \to 0$

denn:

$$\chi = \frac{\beta}{\underbrace{\frac{1}{1-m_0^2}}_{\to \infty \text{ für } m_0^2 \to 1} - \beta J} \longrightarrow 0$$

Plausibel; denn: Für $T \to 0$ sind die Spins „eingefroren"
d.h. es gibt kein thermischen Fluktuation
$\to$ Äußeres Feld kann nicht mehr orientieren!
$\left(\chi = \frac{\partial m}{\partial h}\Big|_{h=0} \right)$

II.7. Korrelationsfunktionen (Ising-Modells)

Betrachte jetzt ein sogenanntes kurzreichweitiges Ising-Modell (konkret: nächste-Nachbar-Wechselwirkung)

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j \in nN \\ \text{nächste Nachbarn}}} s_i s_j - \sum_{i=1}^{N} h_i s_i$$

es gilt (allgemein, unabhängig von der MF-Näherung)

$$m_i = \langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} s_i e^{-\beta H} \quad \text{mit } Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H}$$

definiere nun eine ortsabhängige Suszeptibilität

$$\chi_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial h_j} = \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} s_i \beta s_j e^{-\beta H} - \frac{1}{Z^2} \left(\sum_{\{s\}} s_i e^{-\beta H} \right) \left(\sum_{\{s\}} s_j e^{-\beta H} \beta \right)$$

$$= \beta \langle s_i s_j \rangle - \beta \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

definiere außerdem die Spin-Spin-Korrelationsfunktion

$$G_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

Dann gilt offensichtlich: $\boxed{\chi_{ij} = \beta G_{ij}}$

Ausdruck des Fluktuations-Dissipationstheorems

Suszeptibilität $\hat{=}$ Schwankungen (Fluktuationen)

betrachte nun den feldfreien Fall

d.h. $h_i = 0 \quad \forall i = 1, \dots, N$

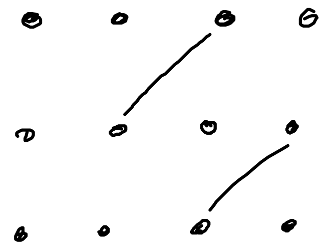
und $\langle s_i \rangle = m_i = m$

Translationsinvarianz!

$$G_{ij} = G(\overbrace{\underline{r}_i - \underline{r}_j}^{\underline{r}})$$

Ortsvektor von Gitterplatz i

Ortsvektor von Gitterplatz j



In einem solchen translationsinvarianten Fall betrachtet man häufig die Fouriertransformierte

$$\hat{G}(\underline{q}) = \sum_{\underline{r}} e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}}\, G(\underline{r})$$

Summe über alle Gitterplätze

Umkehrung:

$$G(\underline{r}) = \frac{1}{N}\sum_{\underline{q}} e^{i\underline{q}\cdot\underline{r}}\, \hat{G}(\underline{q})$$

$$\delta_{\underline{k},\underline{q}} = \frac{1}{N}\sum_{\underline{r}} e^{i(\underline{k}-\underline{q})\cdot\underline{r}}$$

Betrachte $\hat{G}(\underline{q})$ speziell für den Fall $q \to 0$ ($|q|$)

(„langwellige Grenzfall")

$$\lim_{q\to 0} \hat{G}(\underline{q}) = \lim_{q\to 0}\left(\sum_{\underline{r}} e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}}\, G(\underline{r})\right)$$

benutze $e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}} \approx 1 - i\underline{q}\cdot\underline{r} + \frac{1}{2}(-i\underline{q}\cdot\underline{r})^2 + \ldots$

$$= \sum_{\underline{r}} G(\underline{r})$$

$$= \sum_{\underline{r}}\left(\underline{\langle s(\underline{r})\, s(\underline{0})\rangle} - \underbrace{\langle s(\underline{r})\rangle}_{m}\underbrace{\langle s(\underline{0})\rangle}_{m}\right)$$

homogene Suszeptibilität

Uns interessiert jetzt die Abstandsabhängigkeit der Korrelationsfunktion $G(\underline{r})$ dicht am krit. Punkt!

„Ornstein – Zernike – Näherung"
(OZ)

Bem.: Ursprünglich wurde die OZ – Theorie auf Flüssigkeiten angewandt; sie ist aber direkt auf Spin-Systeme übertragbar!

Ausgangspunkt:
Selbstkonsistenzgleichung in MF – Näherung (hier ohne Beweis)

$$m_i = \tanh\Big(\beta\big(\sum_{j \in \text{nächste Nachbarn}} J_{ij} m_j\big) + \beta h_i\Big)$$

$$\text{mit } J_{ij} = \begin{cases} J & \text{falls } i,j \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

daraus die ortsabhängige Suszeptibilität

$$\chi_{kl} = \frac{\partial m_k}{\partial h_l} = \frac{1}{\cosh^2\big(\beta \sum_j J_{kj} m_j + \beta h_k\big)} \Big(\beta \sum_j J_{kj} \underbrace{\frac{\partial m_j}{\partial h_l}}_{\chi_{jl}} + \beta\, \delta_{kl}\Big)$$

$$\cosh^2 x = \frac{1}{1-\tanh^2 x} \underset{\uparrow}{=} \frac{1}{1-m_k^2}$$

Selbstkonsistenzgleichung

$$\Rightarrow \boxed{\chi_{kl} = \left(\frac{1}{1-m_k^2}\right)^{-1} \left(\beta \sum_j J_{kj}\, \chi_{jl} + \beta\, \delta_{kl}\right)}$$

spezialisiere wieder auf den feldfreien, translations invarianten Fall:

$$\chi_{kl} = \beta\, G_{kl}$$

$$= \chi(\underline{r}_k - \underline{r}_l) = \beta\, G(\underline{r}_k - \underline{r}_l)$$

Übergang zur Kontinuumsdarstellung:

Im Ausdruck für χ_{kl} ersetzen wir

$$\delta_{kl} \rightarrow \delta(\underline{r}_k - \underline{r}_l)$$

und
$$\sum_j J_{kj}\, \chi_{jl} \longrightarrow \frac{1}{v} \int d\underline{r}\; \underbrace{J(\underline{r}_k - \underline{r})}_{\text{Kopplungsfunktion, die nur im Bereich der nächsten Nachbarn } \neq 0 \text{ Null ist!}} \chi(\underline{r} - \underline{r}_l)$$

mit v : Volumen einer Einheitszelle des Gitters

$\Rightarrow$ Kontinuierliche Ausdruck für die ortsabhängige Suszeptibilität.

$$\chi(\underline{r}_k - \underline{r}_l) = \left(\frac{1}{1-m^2}\right)^{-1} \frac{\beta}{v} \underbrace{\int d\underline{r}\, J(\underline{r}_k - \underline{r})\, \chi(\underline{r} - \underline{r}_l)}^{\text{Faltungsintegral}} + \beta\, \delta(\underline{r}_k - \underline{r}_l)$$

nun: Fouriertransformation.

$$\hat{\chi}(\underline{q}) = \frac{1}{v} \int d\underline{r}\, e^{-i\underline{q}\cdot\underline{r}}\, \chi(\underline{r})$$

es ergibt sich:

$$\hat{\chi}(\underline{q}) = (1-m^2)\, \beta\, \hat{J}(\underline{q})\, \hat{\chi}(\underline{q}) + \beta$$

auflösen nach $\hat{\chi}(\underline{q})$

man erhält:

$$\boxed{\hat{\chi}(\underline{q}) = \frac{\beta}{\frac{1}{1-m^2} - \beta \hat{J}(\underline{q})}} = \beta \hat{g}(\underline{q})$$

Das ist offensichtlich die direkte Verallgemeinerung unseres früheren Ausdrucks für die homogene Suszeptibilität

$$\chi = \frac{\beta}{\frac{1}{1-m^2} - \beta J} = \left.\frac{\partial m}{\partial h}\right|_{h=0}$$

d.h. die Fouriertransformierte der Kopplungsfunktion, $\tilde{J}(q)$, führt uns direkt zu q-Abhängigkeit von $\tilde{\chi}$ bzw. $\tilde{G}$ und damit auch zu Ortsabhängigkeit!

Idee der Ornstein-Zernike-Theorie:

Fokus auf kleine $|q|$, (d.h. große Abstände im Ortsraum!)

$$\tilde{J}(q) \rightarrow \bar{J} - q^2 J'$$