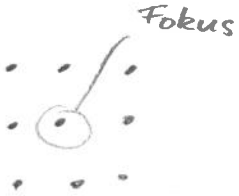
Mean field theory (Molekularfeldtheorie, für die Sprachnörgler)



Viele gleiche Freiheitsgrade: nimm 1, mittle alle anderen.
?

Zustandsfunktion eines einzelnen Spins im Mean Field

$$\mathcal{E} = -J\sigma \cdot \sum_{NN} \sigma' = -J\sigma 2d M$$

$2d = z$ Koordinationszahl

mit $\langle\sigma\rangle \equiv M$ Magnetisierung

$$Z_1 = \sum_{\sigma=\pm 1} e^{\beta J 2 d M \sigma}$$

$$= e^{2KdM} + e^{-2KdM} = 2\cosh(2KdM)$$

$K = \beta J$

$$\log Z_1 = \log 2 + \log(\cosh(2KdM))$$

$$\mathcal{E} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = -\frac{1}{\cosh(2KdM)} \cdot \sinh(2KdM) \cdot 2JdM$$

$$= -\tanh(2KdM) \cdot J2dM$$

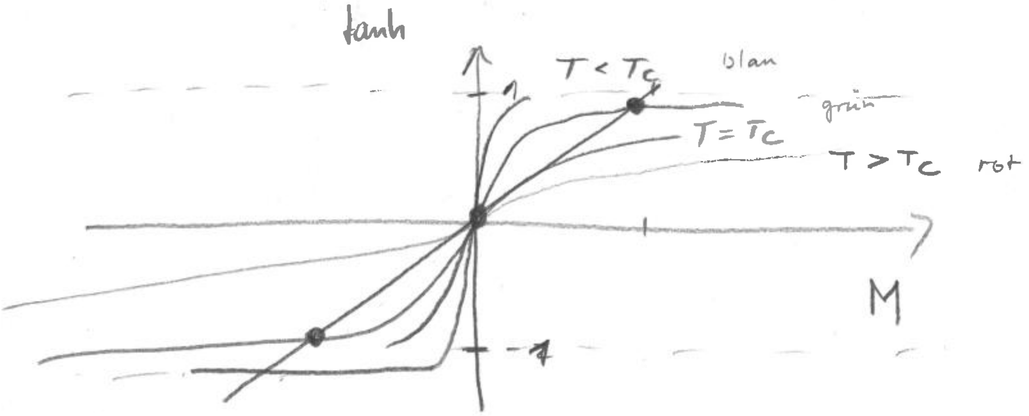
Selbstkonsistent

$$\langle\sigma\rangle \equiv M = -\frac{\mathcal{E}}{J2dM} = \tanh(2KdM)$$

bekannt 'ab intio'

2

$$\left(\begin{array}{l} \text{Mit externem Magnetfeld } H \\ M = \tanh\left(\dfrac{H + 2d J M}{k_B T} \right) \end{array} \right) \text{ analog}$$



$$M = \tanh\left(\frac{2d J M}{k_B T} \right)$$

Welche ist die richtige Lösung? Die mit der höheren Entropie (metastabile Lsg in der Mitte)

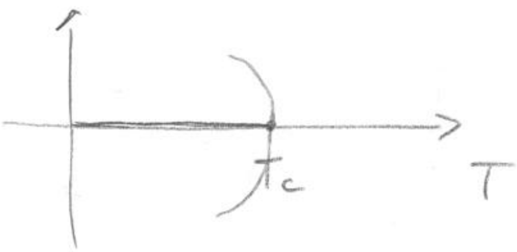
$$\frac{2dJ}{k_B T_c} \overset{!}{=} 1 \qquad \text{Grenzfall}$$

zwei nächste Nachbarn

$$T_c = \frac{2dJ}{k_B}$$

1D : $k_B T_c = 2J$ (0)
2D : $k_B T_c = 4J$ $(\approx 2{,}7)$
3D : $k_B T_c = 6J$ $(\approx \ldots)$

Tieftemperatur $(T \to 0)$



bedenke:
Hamiltonian nur Potentielle Energie
$\Rightarrow$ keine Beweg.-gl.

$$M = \tanh\left(\frac{H}{k_BT} + M\tau\right) \qquad \text{mit} \qquad \tau = \frac{T_c}{T}$$

$$= \frac{\tanh\left(\frac{H}{k_BT}\right) + \tanh(M\tau)}{1 + \tanh\frac{H}{k_BT} \cdot \tanh(M\tau)}$$

$$\tanh(x+y) = \frac{\tanh x + \tanh y}{1 + \tanh x \tanh y}$$

Bronstein → 
(Wikipedia)

$$\tanh\frac{H}{k_BT} = \frac{\tanh(M\tau) - M}{M\tanh(M\tau) - 1}$$

<u>Entwicklung</u>

$$\frac{H}{k_BT} \simeq M(1-\tau) + M^3\left(\tau - \tau^2 + \frac{\tau^3}{3} + \dots\right) + \dots$$

für $H = 0$ und $T \to T_c^-$

$$M^2 = 3\,\frac{(T_c - T)}{T_c} + \dots \qquad \text{mit} \quad \frac{T_c - T}{T_c} = \varepsilon$$

$M \sim \sqrt{\varepsilon}$

$\Rightarrow$ kritischer Exponent $\beta = \frac{1}{2}$

Näherungen Mittelung ü. NN. unbefriedigend!

$\Rightarrow$ Berg zum Propheten!

Problem paßt exakt (per Definition) zum

Infinite Range Model (all-to-all Kopplung)

All-to-all Kopplung (infinite range model)

Mean field Theorie ist (per definition) exakt!

$$-\beta H_\Omega = h \sum_{j=1}^{N} \sigma_j + \frac{K}{2N} \sum_{j,k=1}^{N} \sigma_i \sigma_j$$

mit $\quad S = \sum_{j=1}^{N} \sigma_j$

$$Z = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} e^{hS + \frac{KS^2}{2N}}$$

(Lösung Tip: mit Gaußintegral $\quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = a\sqrt{\pi}$)

Das Ergebnis ist das gleiche wie das für nächste Nachbarn!

Fundametaler Punkt, der die Bedeutung von Fluktuation und Korrelationen unterstreicht.

Durch Mittlung über n. N. gehen Korrelationen verloren, bzw. dies ist Näherung über deren Gültigkeitsbereich und Größenordnung der Korrekturterme wir <u>nichts</u> wissen.

Mean field Theorie am kritischen Punkt

$$-\beta H_\Omega = h\sigma_r + K\sigma_r \sum_{NN} \sigma_{r'} + \text{const.}$$

vgl. nun H_Ω statt H_1

$$-\beta H = \sigma_r\, h_{eff}(r) + \text{const}$$

$$\underbrace{h_{eff}(r)}_{\text{mean field}} = h(r) + K \sum_{NN} \langle \sigma_{r'} \rangle$$

mean field = externes Feld + inter erzeugtes Feld

$$\langle \sigma_r \rangle = \tanh\left(h_{eff}(r)\right)$$

Translationsinvariant

$$\boxed{\langle \sigma \rangle = \tanh\left(h_{eff}\right)} \quad a)$$

$$\boxed{h_{eff} = h + Kz\langle \sigma \rangle} \quad b)$$

$$\boxed{h_{eff} = h + \frac{T_c}{T}\langle \sigma \rangle} \quad c)$$

1. Ordnung

h und $\langle\sigma\rangle$ sehr klein.

$$\langle\sigma\rangle = \tanh\left(h + \frac{T_c}{T}\langle\sigma\rangle\right)$$

$$\simeq h + \frac{T_c}{T}\langle\sigma\rangle$$

$$= \frac{h}{1 - \frac{T_c}{T}}$$

Singularität bei T_c ✓

Suszeptibilität T_c^+ (Magnetisierbarkeit)

$$\chi = \frac{\partial\langle\sigma\rangle}{\partial h} = \frac{1}{1 - \frac{T_c}{T}}$$

Entwicklungsansatz

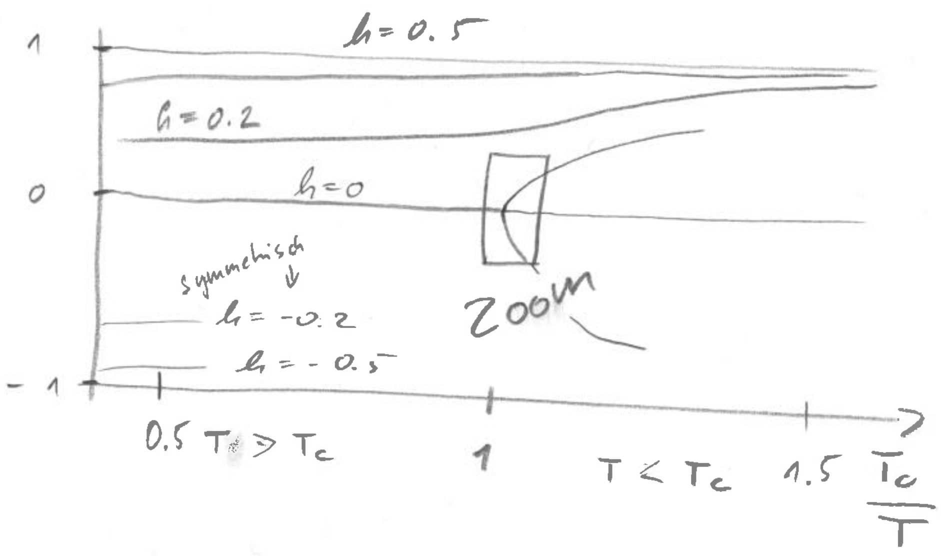
nur für $T > T_c$

für $T < T_c$

Unfug!

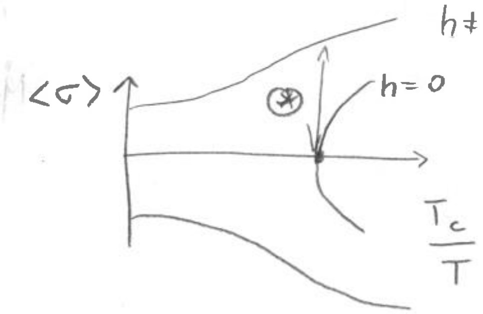
$$\left.\frac{\partial \ln Z}{\partial h}\right|_{K,N} = N\langle\sigma\rangle = \langle M\rangle$$

$$\chi = \frac{\partial}{\partial h}\langle\sigma\rangle = \frac{\langle(M - \langle M\rangle)^2\rangle}{N}$$



6

Für $T \to 0$ $(T < T_c)$ existieren 3 Lösungen



⊛⊛ vgl. 2)

$$\langle\sigma\rangle = h + \langle\sigma\rangle \frac{T_c}{T}$$

h und $\langle\sigma\rangle$ klein

⊛⊛

$$\varepsilon \langle\sigma\rangle = h \qquad \text{mit} \quad \varepsilon = 1 - \frac{T_c}{T}$$

3. Ordnung in h_{eff} (s. 4 a))

$$\varepsilon \langle\sigma\rangle = h - \frac{1}{3}\left(h + (1 - \underset{1)}{\varepsilon}) \langle\sigma\rangle\right)^3$$

$$\left(\tanh x = x - \frac{x^3}{3} + \dots \right)$$

1) $\varepsilon \ll 1$

⊛⊛ 2) $\langle\sigma\rangle \gg h$ ⊛

$$\varepsilon \langle\sigma\rangle = h - \frac{1}{3}\langle\sigma\rangle^3$$