UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Statistischen Mechanik
Wintersemester 2005/06

Übungsblatt 14, Ausgabe 14.02.2006, abzugeben bis 20.02.2006
Besprechung in der Zentralübung am 20.02.2006.

77. **Ising-Modell mit unendlich reichweitiger Wechselwirkung**
Betrachten Sie N Ising-Spins mit folgendem Hamilton-Operator:

$$\mathcal{H} = -H \sum_{i=1}^{N} S_i - \frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} S_i\, S_j .$$

Hier wechselwirken die Spins mit dem äusseren Magnetfeld H sowie alle untereinander mit gleicher Kopplungsstärke $J/2N$. Warum skaliert die Kopplungskonstante mit $1/N$?

a) Es ist sinnvoll, den Hamilton-Operator mittels des Gesamtmoments $M = \sum_{i=1}^{N} S_i$ umzuschreiben. Für die Zustandssumme $Z = \sum_{\{S_i\}} \exp -\beta\mathcal{H}$ lässt sich dann ein geschlossener Ausdruck finden mit Hilfe der sogenannten *Hubbard-Stratonovich-Transformation*. Diese besteht darin, die folgende Identität auszunutzen:

$$e^{\frac{\beta J}{2N} M^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{\sqrt{2\pi/N\beta J}} e^{-\frac{N\beta J}{2}\mu^2 + \beta J \mu M} .$$

Somit ersetzt man die Wechselwirkung der Spins *untereinander* durch die Wechselwirkung mit dem *effektiven mittleren Feld* μ. Da die Spins nun "entkoppelt" sind, kann man genauso vorgehen wie im Fall von unabhängigen Spins im Magnetfeld. Das Ergebnis lautet:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{\sqrt{2\pi/N\beta J}} e^{-\beta N \mathcal{L}(\beta, H, \mu)}$$

wobei

$$\mathcal{L}(\beta, H, \mu) = \frac{J}{2}\mu^2 - \frac{1}{\beta} \ln\left\{2\cosh\beta(H + J\mu)\right\}$$

b) Im thermodynamischen Limes ($N \to \infty$) kann man Z mit Hilfe der Sattelpunktmethode exakt bestimmen. Man bekommt:

$$Z = \sum_i e^{-\beta N \mathcal{L}(\mu_i)},$$

wobei μ_i die Minima von $\mathcal{L}$ sind. Zeigen Sie, dass sich für die Extrema die folgende Gleichung ergibt:

$$\mu = \tanh\beta(H + J\mu).$$

pro Spin $m = \langle M\rangle/N$ gilt:

$$m = \frac{1}{Z}\sum_i \mu_i e^{-\beta N \mathcal{L}(\mu_i)}.$$

Machen Sie sich klar, dass für $N \to \infty$ nur das globale Minimum μ_0 von $\mathcal{L}$ zu m beiträgt, so dass $m = \mu_0$ gilt. Berechnen Sie die zweite Ableitung von $\mathcal{L}$ nach μ und diskutieren Sie den Verlauf von $\mathcal{L}$ als Funktion von μ in Abhängigkeit von der Temperatur und Magnetfeld. Was folgt daraus für die Magnetisierung ?
Hinweis: $\frac{d}{dx}\tanh x = 1/\cosh^2 x$

78. **Korrelationsfunktion in Molekularfeldnäherung**
In der Weißschen Molekularfeldnäherung des Isingmodelles kann auch eine Näherung für die Spin–Spin–Korrelationsfunktion und ihre Korrelationslänge bestimmt werden. Dazu betrachtet man wie in Aufgabe 29 eine einfache Verallgemeinerung des Modells mit einem ortsabhängigen Magnetfeld, B_i mit i dem Platzindex; wie bisher sei z die Zahl der Nachbarn S_j im Gitter, mit denen jeder Spin S_i eine ferromagnetische Kopplung J besitzt.

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{N} B_i\, S_i - \frac{J}{2}\sum_{[i\neq j]} S_i\, S_j.$$

In Molekularfeldnäherung wird die kanonische Freie Energie dieses H abgeschätzt durch ein Modell unabhängiger Spins in effektiven Felder b_i:

$$\mathcal{H}_{\mathrm{MFT}} = -\sum_{i=1}^{N} b_i\, S_i$$

a) Überlegen Sie, weswegen es erstaunlich ist, eine nichttriviale Korrelationsfunktion in Molekularfeldtheorie bestimmen zu können. Hierzu startet man von:

$$G(i,j) = \langle S_i\, S_j\rangle - \langle S_i\rangle\,\langle S_j\rangle = \left.\frac{1}{\beta}\,\frac{\partial\langle S_i\rangle}{\partial B_j}\right|_{B=0}$$

und berechnet $\langle S_i\rangle$ in Molekularfeldnäherung; $T > T_{\mathrm{kr}}$ werde betrachtet.

b) Gehen Sie durch die Rechnungen mit konstantem Magnetfeld B, um die Verallgemeinerung der Selbstkonsistenzgleichung für den mittleren Spin zu finden. Es sind nun die N gekoppelten Gleichungen:

$$\langle S_i\rangle = \tanh\left[\beta\left(B_i + J\sum_{[j]}\langle S_j\rangle\right)\right]$$

wobei die Summe auf der rechten Seite über die Nachbarn S_j von S_i auszuführen ist.

c) Die gekoppelten nichtlinearen Gleichungen müssen linearisiert werden zu:

$$\langle S_i\rangle = \beta\left(B_i + J\sum_{[j]}\langle S_j\rangle\right)$$

um mittels diskreter Fouriertransformation

$$\tilde{S}_{\mathbf{n}} = \sum_{\mathbf{j}} e^{-\frac{2\pi i}{L}\mathbf{j}\cdot\mathbf{n}}\, S_{\mathbf{j}}$$

auf Diagonalgestalt gebracht zu werden. Hierbei ist zur Verdeutlichung der Gitterplatzindex j als d–dimensionaler Vektor $\mathbf{j}$ geschrieben, dessen Komponenten von 1 einem Produkt wird. Führen Sie in einer eindimensionalen Kette die folgende Fouriertransformation genau durch:

$$\sum_l \sum_{[j]} e^{-ilk} \langle S_j \rangle = \sum_l e^{-ilk} \left(\langle S_{l-1} \rangle + \langle S_{l+1} \rangle \right)$$

d) Auf einem d–dimensionalen Gitter, wo $z = 2d$ gilt, folgt also

$$G(\mathbf{k}) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle \tilde{S}_\mathbf{k} \rangle}{\partial \tilde{B}_\mathbf{k}} \bigg|_{B=0} \to \frac{1}{1 - \beta z J \left(1 - \frac{1}{2}\mathbf{k}^2\right)} \qquad \text{für } |\mathbf{k}| \to 0$$

Wie lautet also die Korrelationslänge in $d = 3$? Verwenden Sie, dass $1/\left(1 + \mathbf{k}^2\right)$ die Fouriertransformierte ist von $\frac{1}{4\pi r}\, e^{-r/\xi}$.