Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierte Materie

Moderne Theoretische Physik III (Einführung in die Theorie der Kondensierten Materie) SS 2024

Prof. Dr. A. D. Mirlin
Dr. Risto Ojajärvi and Dr. Paul Pöpperl

Blatt 1, Abgabe bis 29.04.2024
Besprechung 03.05.2024

---

1. Eindimensionales Ising-Modell (10+8+10+10+7+5+10 = 60 Punkte)

Betrachten Sie ein eindimensionales Ising-Modell mit Hamilton-Operator:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{4}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j - \frac{\gamma}{2}B\sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1. \tag{1}$$

Hier bedeutet $\sum_{\langle ij\rangle}$ Summation über nächste Nachbarn. Es gibt N Spins: $i \in [1, 2, \ldots, N]$, wobei $i = 1$ und $i = N$ nicht verbunden sind.

(a) Beweisen Sie mit Hilfe der kanonischen Zustandssumme Z die folgende Relation für die magnetische Suszeptibilität:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{\gamma^2}{4k_BT}\left[\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle - \left\langle\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right\rangle^2\right]. \tag{2}$$

(b) Berechnen Sie $\chi(T, B = 0)$ im Limit $N \gg 1$, mit Hilfe des Ausdrucks für $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$ aus den Vorlesungen:

$$\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = (\tanh g)^{|j-i|}, \quad g \equiv \frac{J\beta}{4}. \tag{3}$$

Vergleichen Sie das Resultat mit dem Ausdruck für χ aus den Vorlesungen.

(c) Nutzen Sie nun die Transfermatrixmethode. Berechnen Sie die Eigenwerte $\lambda_{1,2}$ der Transfermatrizen T, die zugehörende Eigenvektoren $l_1 := |1\rangle, l_2 := |2\rangle$, und die kanonische Zustandssumme Z.

(d) Berechnen Sie die Korrelationsfunktion $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$ für $B > 0$, und zeigen Sie, dass:

$$\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = \frac{\sum_{lmn}\lambda_l^{i-1}\lambda_m^{j-i}\lambda_n^{N-j}\langle l|\sigma_z|m\rangle\langle m|\sigma_z|n\rangle\sum_{\sigma_1\sigma_N}\exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_N)\right)(|l\rangle\langle n|)_{\sigma_1\sigma_N}}{\sum_l\lambda_l^{N-1}\sum_{\sigma_1\sigma_N}\exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_N)\right)(|l\rangle\langle l|)_{\sigma_1\sigma_N}}, \tag{4}$$

wobei $\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$ und $h = \frac{\beta B\gamma}{2}$. Nehmen Sie an, dass i, j nicht genau am Rand sitzen und dass $N \gg 1$. Begründen Sie, warum man hier o.B.d.A. annehmen kann, dass $j > i$.

Hinweis: Im Limit $N \gg 1$ kann man den im vorangegangenen Teil berechneten Ausdruck für Z vereinfachen, analog zur Vorlesungen.

(e) Zeigen Sie, dass der Ausdruck (4) stark vereinfacht werden kann im Limit $N \to \infty$, falls i, j weit weg sind vom Rand und also gelten muss, dass $i-1, N-j \gg |i-j|$. Vergleichen Sie das Resultat mit $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ für periodische Randbedingungen aus der Vorlesungen.

(f) Berechnen Sie jetzt $|\langle 1|\sigma_z|1\rangle|^2$ und $|\langle 1|\sigma_z|2\rangle|^2$, und damit die Korrelationsfunktion $\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2$. Benutzen Sie die gleiche Näherungen wie im oberen Teil.

(g) Nun betrachten wir den Fall $B = 0$, wobei wir als Randbedingung $\sigma_1 = 1$ setzen. Was ist der Zustand des Systems bei $T = 0$? Was ist, nach dem Zustand bei $T = 0$, der Zustand (oder die Zustände) mit niedrigster Energie (also, der erste angeregte Zustand)? Und was sind die zweite, dritte usw. angeregte Zustände? Berechnen Sie so die Zustandssumme über alle angeregten Zustände, und bestimmen Sie $\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle$. Diskutieren Sie das Resultat für $N \to \infty$.

2. Heisenberg-Modell in Molekularfeld-Näherung (10+10+10+10=40 Punkte)

Betrachten Sie den Hamilton-Operator des Heisenberg-Modells

$$H = -\sum_{l,m=1}^{N} J_{l,m} \mathbf{S}_l \mathbf{S}_m - g\mu_{\mathrm{B}} \mathbf{B} \sum_{l=1}^{N} \mathbf{S}_l \tag{5}$$

Hierbei sind die $\mathbf{S}_i$ Spin-S-Operatoren (S ist ganzzahlig oder halbzahlig), $J_{l,m} \in \mathbb{R}$ sind die Kopplungen zwischen Spins l und m und $\mathbf{B}$ ist das externe Magnetfeld.

(a) Führen Sie eine Molekularfeldnäherung für den Hamilton-Operator (5) durch, bringen Sie das Ergebnis auf die Form

$$H^{\mathrm{mf}} = -g\mu_{\mathrm{B}} \sum_{l=1}^{N} \mathbf{B}_l^{\mathrm{mf}} \mathbf{S}_l + E_0 \tag{6}$$

und bestimmen Sie so $\mathbf{B}_l^{\mathrm{mf}}$ und E_0.
Hinweis: In der Molekularfeldnäherung vernachlässigt man im Produkt zweier Operatoren

$$AB = \langle A \rangle B + A\langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \tag{7}$$

den letzten Term $(A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle)$.

(b) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme in Molekularfeldnäherung, unter der Annahme, dass sich die Spins in Richtung des Magnetfeldes ausrichten.

(c) Leiten Sie in der Molekularfeldnäherung Selbstkonsistenzgleichungen für die Spin-Erwartungswerte $\langle S_{z,l} \rangle$ her. Erklären Sie, inwiefern es sich bei den von Ihnen hergeleiteten Gleichungen um Selbstkonsistenzgleichungen handelt. Beschreiben Sie, wie man versuchen könnte, das Gleichungssystem zu lösen.

(d) Betrachten Sie nun den Fall $\mathbf{B} = 0$ und

$$J_{l,m} = \begin{cases} J & l, m \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{8}$$

wobei die Anzahl nächster Nachbarn für jeden Spin z ist.
Suchen Sie eine Lösung, bei der alle Spin-Erwartungswerte gleich sind, $\langle S_{z,l} \rangle =: s \quad \forall l$. Leiten Sie die Übergangstemperatur T_{c} her, unterhalb derer die Selbstkonsistenzgleichung Lösungen mit $s \neq 0$ hat. Fertigen Sie hierzu eine Skizze an.