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

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:

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

Lösung:

$$\chi = k_BT\frac{\partial}{\partial B}\frac{\partial \ln Z}{\partial B} = k_BT\left[\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} - \left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial B}\right)^2\right]. \tag{3}$$

Die Zustandssumme ist gegeben durch:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}}\exp\left[-\beta\mathcal{H}\right] = \sum_{\{\sigma\}}\exp\left[\beta\frac{J}{4}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + \beta\frac{\gamma}{2}B\sum_i\sigma_i\right], \tag{4}$$

wobei $\{\sigma\}$ alle mögliche Mikrozustände bedeutet. Also:

$$\frac{\partial Z}{\partial B} = \frac{\beta\gamma}{2}\sum_{\{\sigma\}}\left(\sum_i\sigma_i\right)\exp\left[\beta\frac{J}{4}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + \beta\frac{\gamma}{2}B\sum_i\sigma_i\right], \tag{5}$$

und

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} = \frac{\beta^2\gamma^2}{4}\sum_{\{\sigma\}}\left(\sum_i\sigma_i\right)^2\exp\left[\beta\frac{J}{4}\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + \beta\frac{\gamma}{2}B\sum_i\sigma_i\right]. \tag{6}$$

Aus der Definition des thermischen Erwartungswertes

$$\langle O \rangle := \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} O \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}} \tag{7}$$

folgt dann:

$$\frac{2}{\beta\gamma} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle, \tag{8}$$

und

$$\frac{4}{\beta^2\gamma^2} \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} = \left\langle \sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j \right\rangle \tag{9}$$

$$= \sum_{i,j} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \tag{10}$$

wobei wir für die zweite Zeile die Linearität des Erwartungswerts genutzt haben. Damit finden wir die gesuchte Relation.

(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:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = (\tanh g)^{|j-i|}, \quad g \equiv \frac{J\beta}{4}. \tag{11}$$

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

Lösung:

Für $B = 0$ muss $\langle \sigma_i \rangle = 0$, weil es keine Vorzugsrichtung des Spins gibt. Deswegen:

$$\chi(T, B = 0) = \frac{\gamma^2\beta}{4} \left[\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \right]. \tag{12}$$

Aus den Vorlesungen wissen wir, dass:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = (\tanh g)^{|j-i|}, \quad g \equiv \frac{J\beta}{4}. \tag{13}$$

Deshalb:

$$\frac{4}{\beta\gamma^2} \chi = \sum_{i=1}^{N} \left(1 + \sum_{j=1}^{i-1} \tanh(g)^{i-j} + \sum_{j=i+1}^{N} \tanh(g)^{j-i} \right) \tag{14}$$

hier haben wir die Summation in $j = i$, $j < i$ und $j > i$ aufgeteilt, um den Betrag im Exponenten aufzulösen. Wir führen die Summen über i mit Hilfe der geometrischen Reihe

$$\sum_{i=1}^{N} x^i = \frac{x(x^N - 1)}{x - 1} \tag{15}$$

aus und erhalten

$$\frac{4}{\beta\gamma^2} \chi = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{-\tanh(g)^{-i+N+1} - \tanh(g)^i + \tanh(g) + 1}{1 - \tanh(g)} \right) \tag{16}$$

jetzt führen wir die verbleidenden Summen über i auch mit der geometrischen Reihe aus:

$$\frac{4}{\beta\gamma^2}\chi = \frac{2\tanh(g)\left(\tanh(g)^N - 1\right) - N\tanh(g)^2 + N}{(\tanh(g)-1)^2} \tag{17}$$

Im Limit $N \gg 1$ verwerfen wir Summanden ohne Vorfaktor N, da $|\tanh(x)| \leq 1$:

$$\frac{4}{\beta\gamma^2}\chi \xrightarrow{N\gg 1} N\frac{1-\tanh(g)^2}{(\tanh(g)-1)^2} \tag{18}$$

jetzt nutzen wir

$$\frac{1-\tanh(g)^2}{(\tanh(x)-1)^2} = \mathrm{e}^{2g} \tag{19}$$

und erhalten nach Umformung

$$\chi \approx N\frac{\gamma^2\beta}{4}\mathrm{e}^{2g}, \tag{20}$$

übereinstimmend mit den Vorlesungen.

(c) Benutzen 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.

Lösung:

Wie in die Vorlesungen, bekommen wir:

$$T_{\sigma\sigma'} = \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma+\sigma')\right)\exp\left(g\sigma\sigma'\right), \tag{21}$$

mit

$$h = \frac{\beta B\gamma}{2}, \quad g = \frac{\beta J}{4}, \tag{22}$$

und identifizieren die Transfermatrix

$$T := \begin{pmatrix} T_{-1,-1} & T_{-1,1} \\ T_{1,-1} & T_{1,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{h+g} & e^{-g} \\ e^{-g} & e^{-h+g} \end{pmatrix} \tag{23}$$

Die Zustandssumme ist etwa anders, weil es keine periodischen Randbedingungen gibt:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_1\right) T_{\sigma_1\sigma_2}T_{\sigma_2\sigma_3}\cdots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}\exp\left(\frac{h}{2}\sigma_N\right) \tag{24}$$

Wir diagonalisieren das Produkt aus Transfermatrizen:

$$T = UDU^{-1}, \quad D = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2), \quad U = \begin{pmatrix} l_1 & l_2 \end{pmatrix}, \tag{25}$$

wobei die Eigenwerte $\lambda_{1,2}$:

$$\lambda_{1,2} = e^g\cosh h \pm \sqrt{e^{2g}\sinh^2 h + e^{-2g}}, \tag{26}$$

wobei λ_1 der (größere) Eigenwert mit dem + ist. Die zugehörigen normierten Eigenvektoren l_1, l_2 sind:

$$l_1 = \frac{1}{\sqrt{1+e^{2g}(\lambda_1 - e^{g-h})^2}} \begin{pmatrix} e^g(\lambda_1 - e^{g-h}) \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{27}$$

$$l_2 = \frac{1}{\sqrt{1+e^{2g}(\lambda_2 - e^{g-h})^2}} \begin{pmatrix} e^g(\lambda_2 - e^{g-h}) \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{28}$$

Wir bekommen damit:

$$Z = \sum_{\sigma_1,\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_1\right) (UD^{N-1}U^{-1})_{\sigma_1\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_N\right) \tag{29}$$

$$= \sum_{\sigma_1,\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_1\right) (\lambda_1^{N-1} l_1 l_1^T + \lambda_2^{N-1} l_2 l_2^T)_{\sigma_1\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_N\right). \tag{30}$$

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

$$\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = \frac{\sum_{lmn} \lambda_l^{i-1}\lambda_m^{j-i}\lambda_n^{N-j}\langle l|\sigma_z|m\rangle\langle m|\sigma_z|n\rangle \sum_{\sigma_1\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_N)\right)(|l\rangle\langle n|)_{\sigma_1\sigma_N}}{\sum_l \lambda_l^{N-1} \sum_{\sigma_1\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_N)\right)(|l\rangle\langle l|)_{\sigma_1\sigma_N}}, \tag{31}$$

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. 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 berechnete Ausdruck für Z vereinfachen, analog zur Vorlesungen.

Lösung:

Die Korrelationsfunktion ist per Definition des thermischen Erwartungswertes und wieder mit Transfermatrix T

$$\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = \frac{1}{Z}\sum_\sigma \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_1\right) T_{\sigma_1\sigma_2}\cdots T_{\sigma_{i-1}\sigma_i}\sigma_i T_{\sigma_i\sigma_{i+1}}\cdots T_{\sigma_{j-1}\sigma_j}\sigma_j T_{\sigma_j\sigma j+1}\cdots T_{\sigma_{N-1}\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_N\right)$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_\sigma \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_1\right) T^{i-1}_{\sigma_1\sigma_i}(\sigma_z T^{j-i})_{\sigma_i\sigma_j}(\sigma_z T^{N-j})_{\sigma_j\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}\sigma_N\right), \tag{32}$$

wobei wir benutzt haben, dass $j > i$. Das ist gerechtfertigt, weil $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = \langle\sigma_j\sigma_i\rangle$. Wir benutzen die Eigen-Zerlegung von T um den Ausdruck zu Vereinfachen:

$$T = \sum_{i=1}^{2} \lambda_i |i\rangle\langle i| \tag{33}$$

$$T^j = \sum_{i=1}^{2} \lambda_i^j |i\rangle\langle i| \tag{34}$$

wobei die zweite Zeile aus Orthonormalität der Eigenvektoren folgt. In der Eigenbasis von T lautet σ_z

$$\sigma_z = \sum_{l,m=1}^{2} \langle l|\sigma_z|m\rangle |l\rangle\langle m|. \tag{35}$$

und das Matrixprodukt $\sigma_z T^j$

$$\sigma_z T^j = \sum_{l,m} \langle l| \sigma_z |m\rangle |l\rangle \langle m| \sum_n \lambda_n^j |n\rangle \langle n| \tag{36}$$

$$= \sum_{l,m} \lambda_n^j \langle l| \sigma_z |m\rangle |l\rangle \langle m| \tag{37}$$

(wieder mit Orthonormalität der Eigenvektoren).
Damit haben wir

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \sigma_i, \sigma_j, \sigma_N} \mathrm{e}^{\frac{h}{2}(\sigma_1 + \sigma_N)} \left[\sum_l \lambda_l^{i-1} |l\rangle \langle l| \right]_{\sigma_1 \sigma_i} \left[\sum_{m,n} \lambda_m^{j-i} \langle n| \sigma_z |m\rangle |n\rangle \langle m| \right]_{\sigma_i \sigma_j} \times \tag{38}$$

$$\times \left[\sum_{o,p} \lambda_o^{N-j} \langle p| \sigma_z |o\rangle |p\rangle \langle o| \right]_{\sigma_j \sigma_N} \tag{39}$$

jetzt führen wir die Summationen über σ_i und σ_j als Matrixmultiplikationen aus

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \sigma_N} \mathrm{e}^{\frac{h}{2}(\sigma_1 + \sigma_N)} \left[\sum_{l,m,n} \lambda_l^{i-1} \lambda_m^{j-i} \lambda_n^{N-j} \langle l| \sigma_z |m\rangle \langle m| \sigma_z |n\rangle |l\rangle \langle n| \right]_{\sigma_1 \sigma_N} \tag{40}$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{l,m,n} \lambda_l^{i-1} \lambda_m^{j-i} \lambda_n^{N-j} \langle l| \sigma_z |m\rangle \langle m| \sigma_z |n\rangle \sum_{\sigma_1, \sigma_N} \mathrm{e}^{\frac{h}{2}(\sigma_1 + \sigma_N)} \left(|l\rangle \langle n| \right)_{\sigma_1 \sigma_N} \tag{41}$$

Im letzten Schritt haben wir benutzt dass für Matrizen A und B gilt $[A+B]_{i,j} = A_{i,j} + B_{i,j}$. Nachdem wir Z genauso ausgeschrieben haben erhalten wir den Ausdruck aus der Aufgabenstellung

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{\sum_{lmn=1}^{2} \lambda_l^{i-1} \lambda_m^{j-i} \lambda_n^{N-j} \langle l|\sigma_z|m\rangle\langle m|\sigma_z|n\rangle \sum_{\sigma_1 \sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1 + \sigma_N)\right) (|l\rangle\langle n|)_{\sigma_1 \sigma_N}}{\sum_l \lambda_l^{N-1} \sum_{\sigma_1 \sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1 + \sigma_N)\right) (|l\rangle\langle l|)_{\sigma_1 \sigma_N}} \tag{42}$$

(e) Zeigen Sie, dass der Ausdruck (31) 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 den Vorlesungen.

Lösung: Im Fall, dass i, j weit weg vom Rand sind, müssen $i-1$ und $N-j$ groß sein im Vergleich mit $j-i$. Dann können wir, wie oben, die Terme λ_2^{i-1} und λ_2^{N-j}

vernachlässigen, und setzen $l = 1$ und $n = 1$. Wir bekommen:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{\sum_{lmn=1}^{2} \lambda_l^{i-1} \lambda_m^{j-i} \lambda_n^{N-j} \langle l|\sigma_z|m\rangle \langle m|\sigma_z|n\rangle \sum_{\sigma_1\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_N)\right) (|l\rangle\langle n|)_{\sigma_1\sigma_N}}{\sum_l \lambda_l^{N-1} \sum_{\sigma_1\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_N)\right) (|l\rangle\langle l|)_{\sigma_1\sigma_N}} \tag{43}$$

$$\approx \frac{\sum_{m=1}^{2} \lambda_1^{i-1} \lambda_m^{j-i} \lambda_1^{N-j} \langle 1|\sigma_z|m\rangle \langle m|\sigma_z|1\rangle \sum_{\sigma_1\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_N)\right) (|1\rangle\langle 1|)_{\sigma_1\sigma_N}}{\lambda_1^{N-1} \sum_{\sigma_1\sigma_N} \exp\left(\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_N)\right) (|1\rangle\langle 1|)_{\sigma_1\sigma_N}} \tag{44}$$

$$= \frac{\sum_{m=1}^{2} \lambda_m^{j-i} \langle 1|\sigma_z|m\rangle \langle m|\sigma_z|1\rangle}{\lambda_1^{j-i}} \tag{45}$$

$$= \sum_{m=1,2} |\langle 1|\sigma_z|m\rangle|^2 \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1}\right)^{j-i}. \tag{46}$$

Das ist genau der Ausdruck aus der Vorlesungen. Der einzige Unterschied zwischen den Systemen sind die Randbedingungen (periodisch in der Vorlesung) und Randbedingungen haben hier keine Relevanz weit vom Rand.

(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.
Lösung:

$$|\langle 1|\sigma_z|1\rangle|^2 = \frac{\sinh^2 h}{\sinh^2 h + e^{-4g}}, \tag{47}$$

$$|\langle 1|\sigma_z|2\rangle|^2 = \frac{e^{-4g}}{\sinh^2 h + e^{-4g}}. \tag{48}$$

Nach Einsetzen erhalten wir:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n}\rangle = \frac{1}{\sinh^2 h + e^{-4g}} \left(\sinh^2 h + \frac{\lambda_2^n}{\lambda_1^n} e^{-4g}\right). \tag{49}$$

Der Korrelator $\langle \sigma_i \rangle$ ist (ähnliche Rechnung wie für $\langle \sigma_i \sigma_j\rangle$)

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{\sum_{l,n} \lambda_l^{i-1} \lambda_n^{N-i} \langle l|\, \sigma_z\, |n\rangle \sum_{\sigma_1,\sigma_N} \mathrm{e}^{\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} (|l\rangle\, \langle n|)_{\sigma_1\sigma_N}}{\sum_l \lambda_l^{N-1} \sum_{\sigma_1\sigma_N} \mathrm{e}^{\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} (|l\rangle\langle l|)_{\sigma_1\sigma_N}} \tag{50}$$

Und in den gegebenen Limits (wieder unter der Annahme dass i weit vom Rand weg ist und $N \gg 1$):

$$\langle \sigma_i \rangle \approx \frac{\lambda_1^{i-1} \lambda_1^{N-i} \langle 1|\, \sigma_z\, |1\rangle \sum_{\sigma_1,\sigma_N} \mathrm{e}^{\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} (|1\rangle\, \langle 1|)_{\sigma_1\sigma_N}}{\lambda_1^{N-1} \sum_{\sigma_1\sigma_N} \mathrm{e}^{\frac{h}{2}(\sigma_1+\sigma_2)} (|1\rangle\langle 1|)_{\sigma_1\sigma_N}} \tag{51}$$

$$= \frac{\lambda_1^{i-1} \lambda_1^{N-i} \langle 1|\, \sigma_z\, |1\rangle}{\lambda_1^{N-1}} \tag{52}$$

$$= \langle 1|\, \sigma_z\, |1\rangle\,. \tag{53}$$

Also insgesamt:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+n}\rangle - \langle \sigma_i\rangle^2 = \frac{1}{\sinh^2 h + e^{-4g}} \frac{\lambda_2^n}{\lambda_1^n} e^{-4g}. \tag{54}$$

(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 $N \to \infty$.

Lösung: Der Zustand mit niedrigster Energie hat alle Spins in die gleiche Richtung, also für $T = 0$ muss dann $\sigma_i = 1, \forall i$. Die niedrigst mögliche höhere Energie bekommt man, wann es genau einen Platz gibt mit einem Spin-wechsel: $|1, 1, \cdots 1, -1, \cdots, -1\rangle$, d.h. es gibt genau ein Domänenwand, übereinstimmend mit $N - 1$ möglichen Konfigurationen. Die höher angeregten Zustände haben also m Domänenwände, mit Energien:

$$E_m = -\frac{J}{4}(N - 1 - 2m), \tag{55}$$

und Entartung $\binom{N-1}{m}$.

Die Zustandssumme ist:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{m=0}^{N-1} \binom{N-1}{m} \exp\left(\frac{\beta J}{4}(N - 1 - 2m)\right) && (56) \\ &= \left(2\cosh\frac{J\beta}{4}\right)^{N-1}. && (57) \end{aligned}$$

Also bekommen wir, weil σ_N nur abhängig ist von m:

$$\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{\beta J}{4}(N-1)\right) \sum_{m=0}^{N-1} \binom{N-1}{m} \exp\left(\frac{\beta J}{2}\right)^m (-1)^m, \tag{58}$$

und damit:

$$\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle = \left(\tanh\frac{\beta J}{4}\right)^{N-1} := \exp\left(-\frac{N-1}{\xi}\right), \tag{59}$$

mit dimensionslose Länge ξ:

$$\xi := -\ln^{-1}\tanh\left(\frac{\beta J}{4}\right). \tag{60}$$

Weil ξ nur von der Temperatur abhängig ist, muss im Limit $N \gg \xi$ die Korrelation $\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle \to 0$.

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

Betrachten Sie den Hamilton-Operator des Heisenberg-Modells

$$H = -\sum_{l,m=1}^{N} J_{l,m}\mathbf{S}_l\mathbf{S}_m - g\mu_{\mathrm{B}}\mathbf{B}\sum_{l=1}^{N}\mathbf{S}_l \tag{61}$$

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

(a) Führen Sie eine Molekularfeldnäherung für den Hamilton-Operator (61) durch, bringen Sie das Ergebnis auf die Form

$$H^{\mathrm{mf}} = -g\mu_{\mathrm{B}} \sum_{l=1}^{N} \mathbf{B}_l^{\mathrm{mf}} \mathbf{S}_l + E_0 \tag{62}$$

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

$$AB = \langle A\rangle B + A\langle B\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle + (A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle) \tag{63}$$

den letzten Term $(A - \langle A\rangle)(B - \langle B\rangle)$.
Lösung: Wir schreiben das Produkt der Spin-Operatoren als

$$\mathbf{S}_l\mathbf{S}_m = \langle\mathbf{S}_l\rangle\mathbf{S}_m + \mathbf{S}_l\langle\mathbf{S}_m\rangle - \langle\mathbf{S}_l\rangle\langle\mathbf{S}_m\rangle + \left(\mathbf{S}_l - \langle\mathbf{S}_l\rangle\right)\left(\mathbf{S}_m - \langle\mathbf{S}_m\rangle\right). \tag{64}$$

In der Molekularfeldnäherung vernachlässigen wir nun wie in der Vorlesung den letzten Term. Damit lesen wir ab

$$E_0 = \sum_{l,m=1}^{N} J_{l,m}\langle\mathbf{S}_l\rangle\langle\mathbf{S}_m\rangle \tag{65}$$

$$g\mu_{\mathrm{B}}\mathbf{B}_l^{\mathrm{mf}} = 2\sum_{m=1}^{N} J_{l,m}\langle\mathbf{S}_m\rangle + g\mu_{\mathrm{B}}\mathbf{B}. \tag{66}$$

(b) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme in Molekularfeldnäherung, unter der Annahme, dass sich die Spins in Richtung des Magnetfeldes ausrichten. Sie können nutzen, dass $\displaystyle\sum_{x=-L}^{L} \exp(xa) = \frac{\sinh\left(\frac{a}{2}(2L+1)\right)}{\sinh(a/2)}$.
Lösung: Definition der kanonischen Zustandssumme: (mit $B_l =: \hat{e}_z\mathbf{B}_l^{\mathrm{mf}}$)

$$Z = \sum_{\{s_l\}} \exp\left(-\beta H^{\mathrm{mf}}\right) \tag{67}$$

$$= \exp(-\beta E_0)\prod_{l=1}^{N} Z_l \qquad Z_l := \sum_{s=-S}^{S} \exp(\beta s g\mu_{\mathrm{B}} B_l) \tag{68}$$

Wir nutzen die gegebene Relation, um die Summe auszuführen:

$$Z_l = \frac{\sinh(B_l\beta\mu_{\mathrm{B}}g(2S+1)/2)}{\sinh(\beta B_l\mu_{\mathrm{B}}g/2)} \tag{69}$$

$$=: \frac{\sinh(B_l x(2S+1))}{\sinh(B_l x)} \qquad x := \beta\mu_{\mathrm{B}}g/2 \tag{70}$$

(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.

Lösung: Kanonischer Ensembleerwartungswert des Spins $S_{z,l}$

$$\langle S_{z,l}\rangle = \frac{\sum_{\{s_m\}} S_{z,l}\exp\left(-\beta H^{\mathrm{mf}}\right)}{\sum_{\{s_m\}}\exp(-\beta H^{\mathrm{mf}})} \tag{71}$$

$$= \frac{\sum_{s_l=-S}^{S} s_l \exp(2xs_lB_l)}{Z_l} \tag{72}$$

$$= \frac{1}{Z_l}\frac{1}{2x}\frac{\partial Z_l}{\partial B_l} \tag{73}$$

$$= \frac{1}{2}\Big[(1+2S)\coth(B_lx(1+2S)) - \coth(xB_l)\Big] \tag{74}$$

Hierbei handelt es sich um Selbstkonsistenzgleichungen, da $\langle S_{z,l}\rangle$ auf der linken und rechten Seite der Gleichung steht (die Felder B_l hängen von den $\langle S_{z,l}\rangle$ ab). Die Erwartungswerte, die mit dem genäherten Molekularfeld-Hamilton-Operator ausgerechnet werden müssen also konsistent mit den Erwartungswerten sein, die in die Näherung eingehen.
Ein möglicher Lösungsansatz wäre, ein Set von $\langle S_{z,l}\rangle$ zu raten und dieses auf der rechten Seite einzusetzen, um dann ein neues Set zu erhalten; und das so lange zu wiederholen, bis die Werte konvergieren (iterative Methode).

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

$$J_{l,m} = \begin{cases} J & l,\, m \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{75}$$

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.

Lösung: B_l ist jetzt unabhängig vom Gitterplatz:

$$g\mu_{\mathrm{B}}B_l = 2s\sum_{m=1}^{N} J_{l,m} \tag{76}$$

$$= 2sJz \tag{77}$$

Wir erhalten für die Selbstkonsistenzgleichung:

$$s = \frac{1}{2}\Big[(1+2S)\coth(s\alpha(1+2S)) - \coth(s\alpha)\Big] =: f(s) \qquad \alpha := \beta Jz \tag{78}$$

Die Skizze geht analog zur Vorlesung: Wir tragen jeweils die linke- und rechte Seite der Gleichung über s auf. Die linke Seite ist also eine Ursprungsgerade mit Steigung 1. Die rechte Seite wächst monoton, und geht gegen $\pm S$ für $s \to \pm\infty$. Ist die Steigung am Ursprung kleiner 1, so ist der einzige Schnittpunkt am Ursprung und somit die einzige erlaubte Lösung der Gleichung $s = 0$. Wenn die Steigung aber > 1 ist, dann gibt es auch Lösungen ungleich 0. Wir berechnen also die Übergangstemperatur zwischen diesen Fällen, indem wir die Steigung der rechten

Seite bei $s = 0$ betrachten:

$$\left.\frac{\partial f(s)}{\partial s}\right|_{s\to 0} = \frac{2}{3}S(1+S)\alpha \overset{!}{=} 1 \tag{79}$$

$$\Rightarrow \alpha = \frac{3}{2S(S+1)} \tag{80}$$

$$\Leftrightarrow \beta_{\mathrm{c}} = \frac{3}{2JzS(S+1)} \tag{81}$$

Wir finden die Übergangstemperatur

$$T_{\mathrm{c}} = \frac{2JzS(S+1)}{3k_{\mathrm{B}}}. \tag{82}$$