

Moderne Theoretische Physik III SS 2015

Prof. Dr. A. Mirlin

Blatt 09, 100 Punkte

Dr. U. Karahasanovic, Dr. I. Protopopov

Besprechung 26.06.2015

Die Abgabe ist jeweils bis spätestens Freitag, 09:30 Uhr in den dafür vorgesehenen Kasten im Eingangsbereich des Physik-Hochhauses zu tätigen.

1. Domänenwände im Ising-Modell

(5 + 5 + 5 + 10 + 5 + 10 + 20 = 60 Punkte, schriftlich)

Das Ising-Modell wurde im Kurs bereits auf unterschiedliche Arten studiert. Das System wird durch den Hamilton-Operator (ohne externes Feld) beschrieben:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

Die Summation erfolgt über alle Paare von nächsten Nachbarn. Wir haben bereits gesehen, dass das 1D-Ising-Modell exakt gelöst werden kann (z.B. mit der Transfermatrixmethode). Eine Isingkette ohne externes Magnetfeld hat Magnetisierung Null bei endlicher Temperatur. Die Spin-Spin-Korrelationsfunktion $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ fällt immer exponentiell ab. Es gibt keinen Phasenübergang bei endlicher Temperatur.

Andererseits sagt die Mean-Field-Näherung (auch Molekularfeldnäherung) des Ising-Modells (beliebige Raumdimension) einen Phasenübergang in einen geordneten Zustand bei der kritischen Temperatur

$$T_c = \frac{zJ}{k_B} \quad (2)$$

voraus. Hier ist z die Koordinationszahl, d.h. die Anzahl der nächsten Nachbarn zu einem gegebenen Spin (Die Kette hat $z = 2$). Der geordnete Zustand wird durch eine spontane Magnetisierung $\langle \sigma \neq 0 \rangle$ und die Spin-Spin-Korrelationsfunktion charakterisiert, die für große Distanzen konstant wird ($\langle \sigma \rangle^2$).

Der bei Mean-Field-Näherung vorausgesagte Phasenübergang findet tatsächlich in allen Dimensionen $D \geq 2$ statt. In 1D dagegen versagt die Mean-Field-Näherung hingegen. Tatsächlich können in 1D keine Phasenübergänge bei endlicher Temperatur stattfinden. In dieser Übung versuchen wir zu verstehen, warum Fluktuationen die Ordnung in 1D immer zerstören, in höheren Dimensionen (bei hinreichend niedrigen Temperaturen) dagegen nicht.

- (a) Wir betrachten eine 1D Ising-Kette, die aus $N \gg 1$ Spins besteht. Es ist praktisch anzunehmen, dass ein sehr großes Magnetfeld lokal auf *einen* Spin σ_1 wirkt. Das Magnetfeld zwingt σ_1 nach oben zu zeigen ($\sigma_1 = 1$). Diese Randbedingung garantiert, dass bei $T = 0$ alle Spins nach oben zeigen (Das ist der nicht entartete Grundzustand des Systems). Bei endlicher Temperatur angeregte Zustände tragen zur Zustandssumme bei. Die angeregten Zustände niedrigster Energie sind die mit jeweils einer einzelnen Domänenwand, d.h.

$$\sigma_i = \begin{cases} 1, & i \leq k, \\ -1 & i > k, \end{cases} \quad (3)$$

wobei $1 \leq k \leq N - 1$. Berechne die Energie eines solchen Zustands und finde den Beitrag dieser Zustände mit einer Domänenwand zur Zustandssumme des Systems.

- (b) Zeige, dass alle angeregten Zustände der Kette voll durch die Anzahl und die Positionen der Domänenwände im System charakterisiert werden. Berechne die Energie eines Zustandes mit m Domänenwänden. Berechne die Anzahl der Zustände mit m Domänenwänden.

Hinweis: Die Anzahl von Zuständen ist gegeben durch

$$\Gamma(m) = \frac{(N-1)!}{m!(N-m-1)!} \quad (4)$$

- (c) Notiere die Zustandssumme des Systems als eine Summe über die Anzahl der Domänenwände.
- (d) Wir diskutieren den Effekt von Domänenwänden auf die Spin-Spin-Korrelationsfunktion. Die charakteristische Eigenschaft in 1D ist, dass die Anwesenheit einer Domänenwand die Spins in beliebig weiter Entfernung beeinflusst. Insbesondere ist $\sigma_N = -1$ in in jeder Konfiguration unabhängig von der Größe N des Systems. Wir vernachlässigen die Möglichkeit mehr als eine Domänenwand im System zu haben. Berechne in dieser Näherung die durchschnittliche Anzahl von Spins N_- , die nach unten zeigen. Zeige, dass bei beliebiger endlicher Temperatur das Verhältnis für große N , N_-/N gegen $1/2$ geht. Dies deutete auf die Abwesenheit von langreichweitiger Ordnung im System hin. *Hinweis:* Benutze die Zustandssumme von Übung 1a.
- (e) Schreibe die Spin-Spin-Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle$ zwischen den zwei Enden des Systems als Summe über die Anzahl der Domänenwände. Berechne $\langle \sigma_1 \sigma_N \rangle$ und zeige, dass der Zerfall für $N \gg 1$ wie $e - N/\xi$ geht. Finde die Korrelationslänge ξ .
- (f) Betrachten wir nun das 2D-Ising-Modell, bestehend aus N Spins, die auf einem quadratischen Gitter in einer Gebiet auf einer Ebene sitzen. Wir wählen die Randbedingung so, dass die Spins am Rand nach oben zeigen (Starkes lokales Magnetfeld). Bei $T = 0$ garantiert dies, dass in dem System alle Spins nach oben zeigen. Wir wollen zeigen, dass bei hinreichend geringen Temperaturen der Bruchteil an Spins, die nach unten zeigen, selbst im thermodynamischen Limes $N \gg 1$ klein bleibt. Was sind die angeregten Zustände des Systems mit der kleinsten möglichen Energie? Berechne die durchschnittliche Anzahl von Spins, die nach unten zeigen, wobei nur die niedrigsten angeregten Zustände betrachtet werden sollen. Vergleiche das Ergebnis mit dem Ergebnis der 1d.

Hinweis: Die einfachste Anregung ist ein Spin-Flip.

- (g) Das 2D-Ising-Modell kann auch formuliert werden, in dem man Domänen betrachtet. Die einfachsten Anregungen die in der 1f betrachtet werden, können als kürzest mögliche Domänenwände (der Länge 4) angesehen werden. Wir wollen wissen, ob längere Domänenwände bei niedrigen Temperaturen wichtig werden. Gebe eine obere Schranke für den Beitrag der Domänenwände der Länge l zur Zustandssumme an, um diese Frage zu beantworten. Wie verhält sich der Beitrag als Funktion von l bei niedrigen Temperaturen? *Hinweis:* Berechne die Energie einer Konfiguration mit Domänenwand der Länge l und schätze die Anzahl solcher Konfigurationen ab.

2. Wechselwirkung mit unendlicher Reichweite und Mean-Field-Theorie.

(10 + 10 + 10 + 10 = 40 Punkte, mündlich)

Wir betrachten wechselwirkende Ising-Spins (unendliche Reichweite der Wechselwirkung)

$$H = -\frac{J}{N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \mathcal{H} \sum_i \sigma_i \quad (5)$$

Die erste Summation läuft über *alle* Spinpaare. Der Faktor $1/N$ vor der Summe ist notwendig um ein korrektes thermodynamisches Limit zu erreichen. Im thermodynamischen Limit wechselwirken die Spins schwach untereinander. Der Zweck dieser Übung ist es, eine weitere Herangehensweise an die Mean-Field-Theorie zu zeigen und außerdem zu zeigen, dass Mean-Field-Theorie in Modellen mit langreichweitiger Wechselwirkung exakt wird.

- (a) Schreibe die Zustandssumme des Systems. Benutze die Hubbard-Stratonovich-Transformation um die Zustandssumme als Integral über die Hilfsvariable h zu schreiben.

Hinweis: Die Hubbard-Stratonovich-Transformation erlaubt es wechselwirkende Spins in Gleichung (5) zu entkoppeln. Die Transformation basiert auf (Nachprüfen!)

$$\exp \left[\frac{J\beta}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j \right] = \exp \left[\frac{J\beta}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 \right] = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} \int dh \exp \left[-\frac{\beta N h^2}{2J} + \beta h \sum_i \sigma_i \right] \quad (6)$$

- (b) Führe die Summation σ_i aus und zeige, dass die Zustandssumme des Systems folgendermaßen ausgedrückt werden kann:

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}} \int dh \exp[-\beta \mathcal{G}(\mathcal{H}, T, h)] \quad (7)$$

Berechne die Funktion $\mathcal{G}(h)$.

- (c) Zeige, dass im Grenzfall $N \gg 1$ die Integration über h mittels der Sattelpunktmethode durchgeführt werden kann. Finde die Sattelpunktgleichung und zeige, dass diese identisch zur Selbstkonsistenzgleichung der Mean-Field-Theorie ist, sofern wir $h = \mathcal{H}_{\text{eff}} - \mathcal{H}$ identifizieren.
- (d) Berechne Z (mittels der Sattelpunktmethode) und finde die Gibbs'sche freie Energie des Systems $G(T, \mathcal{H})$. Finde die Magnetisierung $m(T, \mathcal{H})$.