Das Ising-Modell

(Ernst Ising, 1924)

Betrachten ein Gitter von Spins $\hat{S}_i^z \to \frac{\hbar}{2}(\pm 1)$

$$H = -\sum_{ij} J_{i,j} S_i S_j - B \sum_i S_i$$

$S_i = \pm 1$

i,j Gitterplätze

Austauschwechselwirkung

magnetisches Feld

betrachte zwei Gitterplätze i,j

$J_{i,j} > 0$ $\quad\uparrow \quad \uparrow$ (bei $T \to 0$)

(ferromagnetische Kopplung)

$J_{i,j} < 0$ $\quad\uparrow \quad \downarrow$

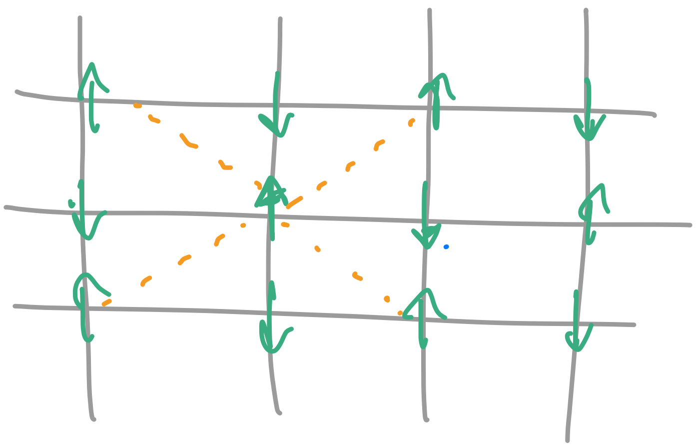
(antiferromagnetische Kopplung)

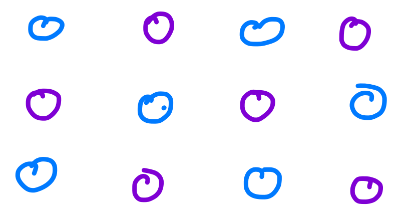
1. Wenn alle $J_{ij} > 0 \Rightarrow$ bei $T=0$ sind alle Spins gleich ausgerichtet

$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$ (Ferromagnet)

(2.) Andernfalls kann man i.A. nicht sehr viel aussagen.

Der Grundzustand hängt vom Gitter, und von den genauen Werten der J_{ij} ab.





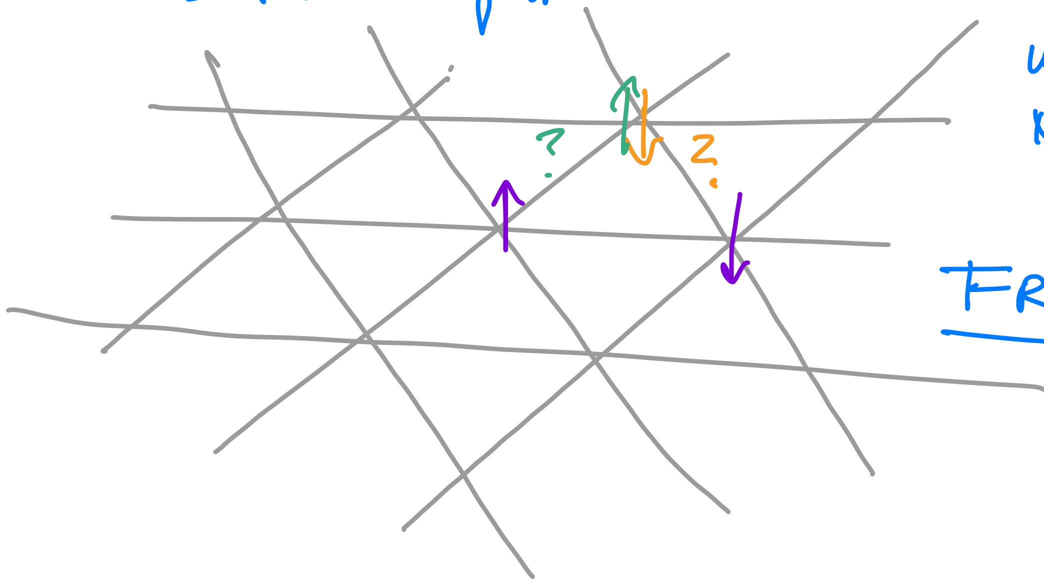
bipartites Gitter
(O hat nur O als nächste Nachbarn)

- Quadratgitter
  i) nur nächste Nachbarwechselwirkung $J<0$
  $\Rightarrow$ Antiferromagnet ist Grundzustand. (Néel zustand)
  ii) weitere Wechselw. $J'<0$ zwischen übernächsten Nachbarn

Es ist i.A. unklar welcher Zustand der günstigste ist

Das Spinsystem ist FRUSTRIERT

Dreiecks Gitter

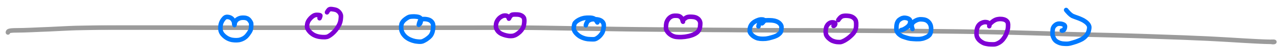


mit nächster Nachbar WW. $J<0$

FRUSTRATION

Lösung des eindimensionalen Ising-Modells

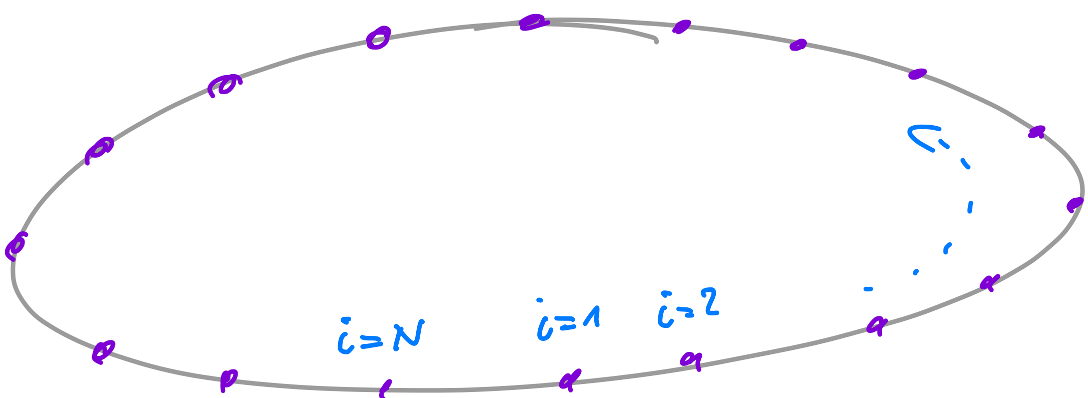
(nur nächste Nachbar Wechselwirkung)



$J<0$ $\quad \uparrow \ \downarrow \ \uparrow \ \downarrow \ \uparrow \ \downarrow \ \uparrow \ \downarrow \ \uparrow \ \downarrow \ \uparrow$

$J>0$ $\quad \uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow \ \uparrow$

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} - B \sum_i S_i$$



$S_{N+1} = S_1$

(periodische Randbedingungen)

Berechnung der Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{-\beta H}$$

$$= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \underbrace{e^{\beta \sum_{i=1}^{N} \left(J S_i S_{i+1} + \frac{B}{2}(S_i + S_{i+1})\right)}}_{\prod_{i=1}^{N} e^{\beta\left(J S_i S_{i+1} + \frac{B}{2}(S_i+S_{i+1})\right)}}$$

$$\hat{=} \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \cdots \langle S_N | T | S_1 \rangle$$

Transfermatrix:

$$\langle S_i | T | S_{i+1} \rangle = e^{\beta\left(J S_i S_{i+1} + \frac{B}{2}(S_i + S_{i+1})\right)}$$

$$|S_e\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_e \text{ oder } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_e$$

$$(+1) \qquad\qquad (-1)$$

$$\left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \middle| T \middle| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle = e^{\beta(J+B)}$$

$$\left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \middle| T \middle| \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle = e^{-\beta J}$$

$$\Rightarrow \quad T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-B)} \end{pmatrix}$$

$$Z = \sum_{S_1=\pm1} \sum_{S_2=\pm1} \cdots \sum_{S_N=\pm1} \overbrace{\langle S_1|T|S_2\rangle\langle S_2|T|S_3\rangle}^{\langle S_1|T^2|S_3\rangle} \cdots$$

$$\cdots \langle S_{N-1}|T|S_N\rangle\langle S_N|T|S_1\rangle$$

$$= \sum_{S_1=\pm1} \langle S_1|T^N|S_1\rangle = \mathrm{Tr}\,(T^N)$$

Es seien λ_+ und λ_- die Eigenwerte von T

$$\Rightarrow \quad T^N \sim \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix}$$

$$\underline{Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N}$$

$$x = \beta B \quad ; \quad y = \beta J$$

Eigenwerte:

$$\lambda_\pm = e^y \cosh(x) \pm \left(e^{-2y} + e^{2y}\sinh^2(x)\right)^{1/2}$$

$$\lambda_+ > \lambda_-$$

Freie Energie:

$$F = -k_B T \log Z = -k_B T \log\left\{\lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)\right\}$$

$$= -N k_B T \log \lambda_+ - k_B T \log\left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)$$

thermodynamischer Grenzfall $N \to \infty$

$$\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \xrightarrow[N\to\infty]{} 0$$

$$\boxed{F(N,T,B) \to -N k_B T \log \lambda_+}$$

Ohne Wechselwirkung $J=0$

$$F_{J=0}(N,T,B) = -N k_B T \log\left(2\cosh(\beta B)\right)$$

freie Energie von freien Spins im Magnetfeld. ✓

Gibt es einen Phasenübergang?

$$M(T,B) = -\frac{\partial F}{\partial B}$$

$$= N \frac{\sinh(\beta B)}{\left(e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta B)\right)^{1/2}}$$

bleibt diese Magnetisierung für $B \to 0$ endlich?

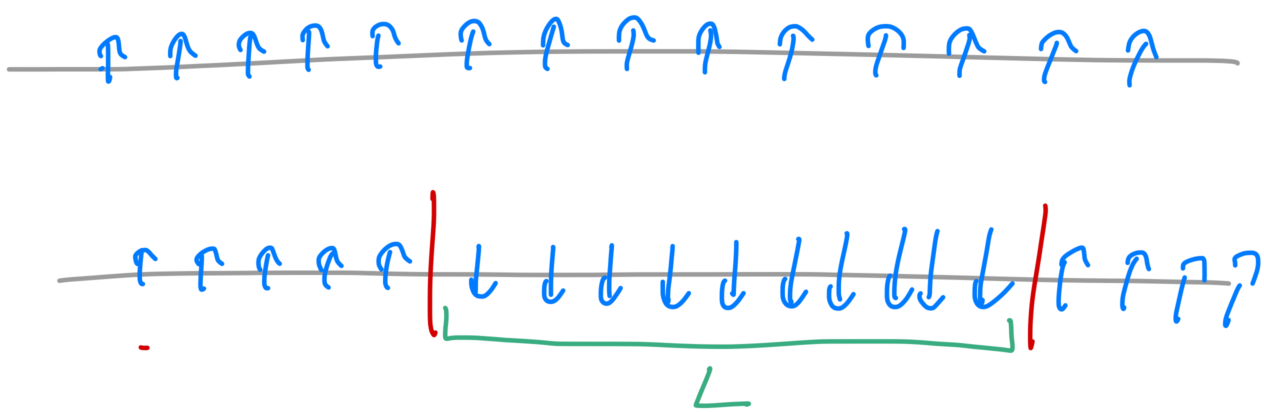
bei endlichen Temperaturen $T > 0$

$$M(T, B\to 0) \to 0$$

bei $T=0$ $(\beta \to \infty)$

$$M(T=0, B\to 0) = N$$

Es tritt kein Phasenübergang bei einer endlichen Temperatur auf



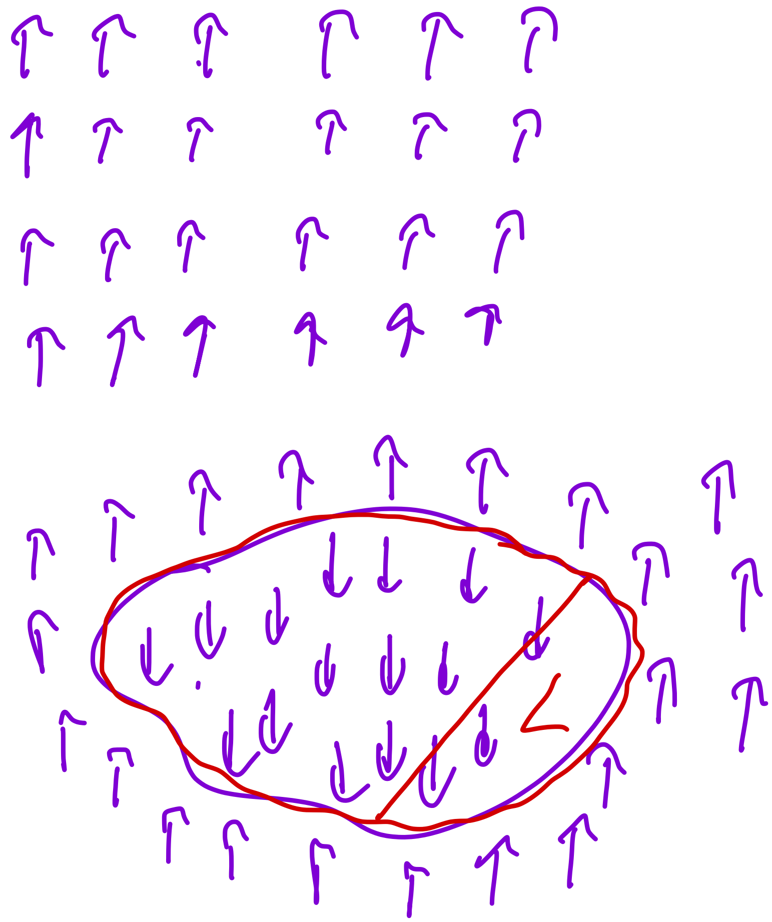
$$\delta F \sim +2J - T \log L$$

bei jeder endlichen Temperatur gibt es für ausreichend große Gebiete

$$L > L^* \sim e^{2J/T}$$

die zu einem Entropiegewinn führen.

betrachten wir $d=2$



$$F = J L - T \log L^2$$

der energetische Verlust bei kleinem T ist viel größer als der entropische Gewinn einer solchen Tropfenkonfiguration.

$\Longrightarrow$ in $d=2$ erwarten wir einen Phasenübergang!!

Kommentar zur exakten Lösung des Zwei-dimensionalen Ising-Modells (L. Onsager, 1944)

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i$$

nächste Nachbarn

1944: $B = 0$

$$f(T) = \lim_{N \to \infty} \frac{F(T,N)}{N} = -k_B T \log Z_1(T)$$

$$\log Z_1 = \frac{1}{\pi} \log\left(2 \cosh(2\beta J)\right) + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\phi \log\left(\frac{1 + \sqrt{1 - k^2 \sin^2\phi}}{2} \right)$$

$$k(\beta) = \frac{2 \sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)}$$

$$k(\beta_c) = 1 \Rightarrow \tanh(2\beta_c J) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$k_B T_c = 2J / \operatorname{arcoth}(\sqrt{2}) \simeq 2{,}269\, J$$

Es findet, wie erwartet ein Phasen-übergang statt.

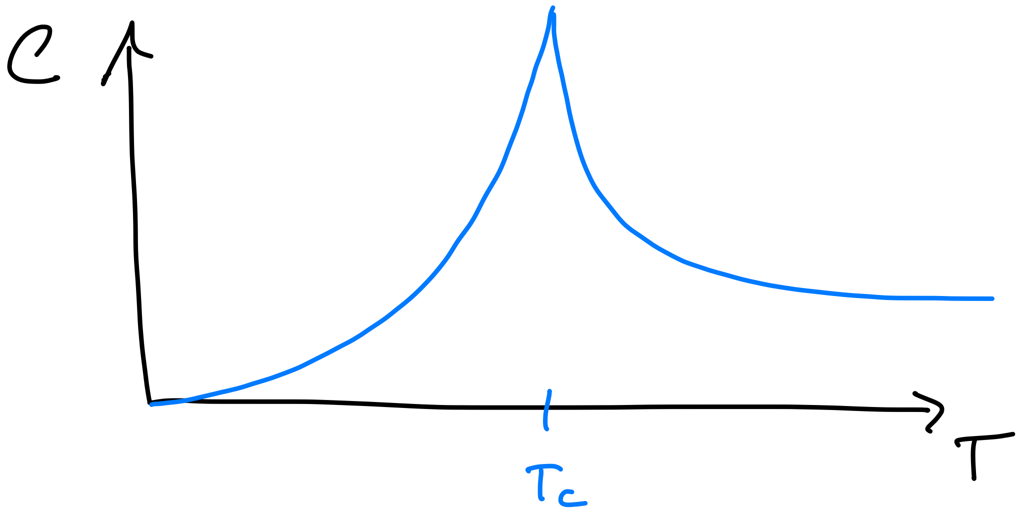
$$C(T) = -T \frac{\partial^2 f(T)}{\partial T^2} = k_B \beta^2 \frac{\partial^2 \log Z_1}{\partial \beta^2}$$

$$\left(\beta = \frac{1}{k_B T}\right)$$

$$C(T \simeq T_c) = k_B \frac{4J^2}{\pi (k_B T_c)^2} \left(3 \log 2 - \frac{\pi}{2} + \log\left(\frac{k_B^2 T_c^4}{4J^2 (T - T_c)^2}\right) + \dots \right)$$

es entsteht eine Singularität in der 2. Ableitung der freien Energie

$\Longrightarrow$ P.Ü. 2. Ordnung



dies ist nicht das erwartete Verhalten

$$C(T) \sim (T-T_c)^{-\alpha}$$

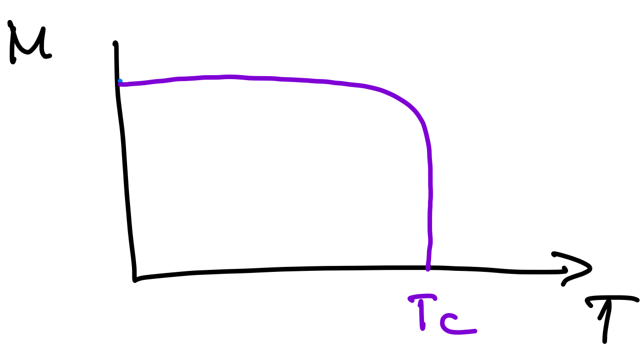
„$\alpha = 0$“

$$\left(x^{-\alpha} = e^{-\alpha \log x} \simeq 1 - \alpha \log x \right)$$

1948

$$M(T) = \left(1 - \frac{1}{\sinh^4(2\beta J)} \right)^{1/8}$$

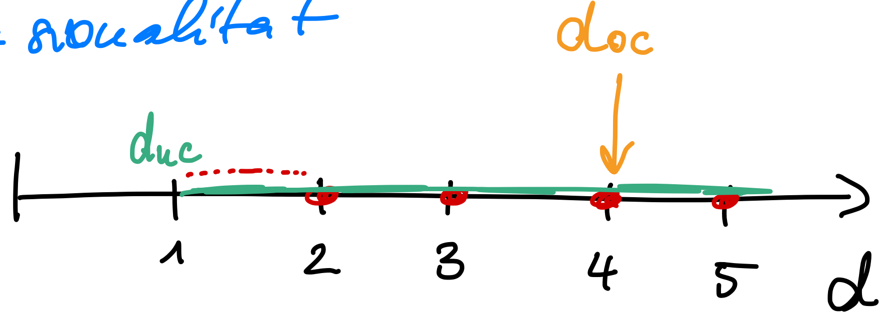
$$\simeq (T_c - T)^{-\beta} \qquad \beta = \frac{1}{8}$$



Beras 1952
C.N. Yang

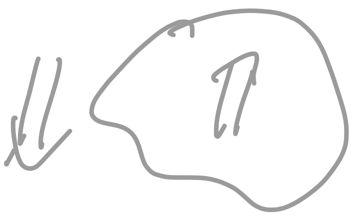
Rolle der Dimensionalität

Ising-Modell



Defektstruktur

$$J L^{d-1} - T \log L^d$$

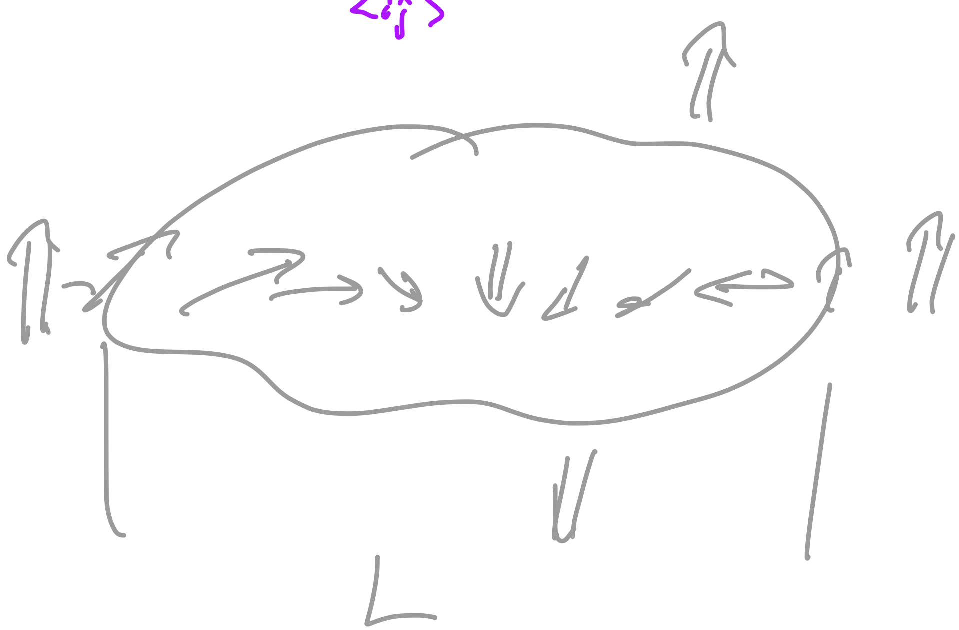


$d > 1 \Rightarrow$ Ordnung

unterkritische Dimension d_{uc}, so dass für $d > d_{uc}$ Ordnung auftritt!!

Heisenberg-Modell

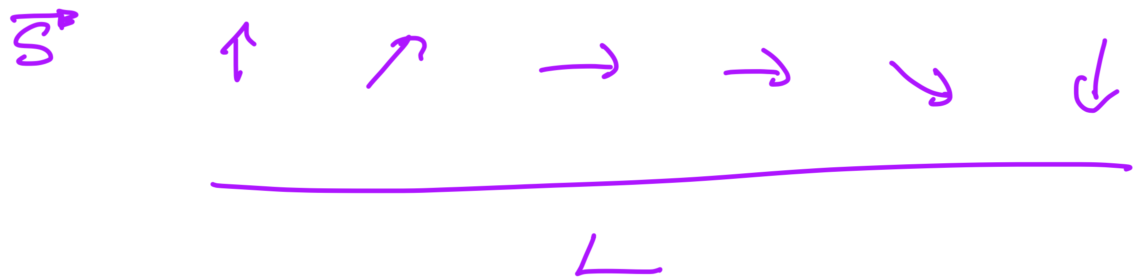
$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \qquad \vec{S}_i^{\,2} = 1$$

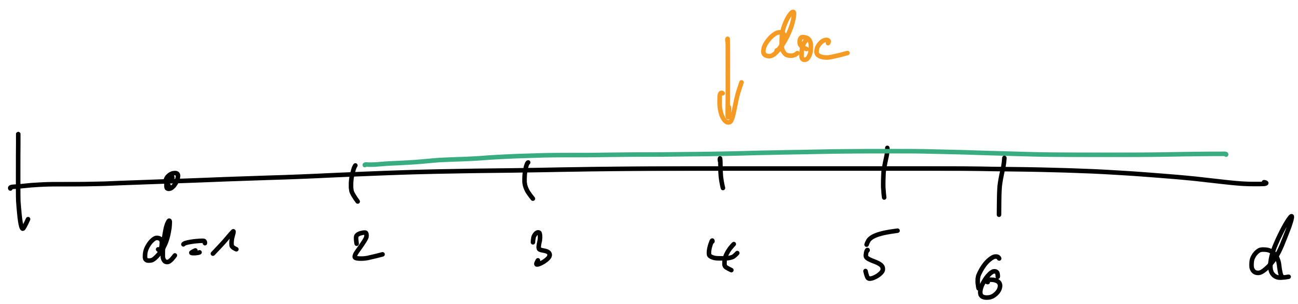


L^{d-2}

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{1}{2}\left(\left(\vec{S}_i - \vec{S}_j\right)^2 - 2 \right)$$

$$\propto \frac{a^2}{2} \left(\nabla \vec{S}\right)^2 + \text{const}$$





$d_{uc} = 2$ für das Heisenberg-Modell

$d > d_{oc}$ (oberkritische Dimension)

ist das Verhalten am Phasenübergang durch eine Molekularfeldtheorie korrekt beschrieben!