4.2 Transfermatrixmethode

4.2.1 Ising-Modell

Im Jahre 1920 veröffentlichte Wilhelm Lenz in der Physikalischen Zeitschrift, Band 21, S. 613 eine Arbeit mit dem Titel "Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern". Dabei formulierte er zum ersten Mal die grundlegenden Ideen eines mikroskopischen Modells des Ferromagnetismus, das heute unter dem Namen Ising-Modell zu einem Standardmodell der statistischen Physik geworden ist. Heute erscheinen jährlich über 800 Arbeiten, die sich auf dieses Modell beziehen. Die Aufgabe, das Modell genauer zu untersuchen, übertrug Lenz seinem Schüler Ernst Ising, der darüber 1924 in Hamburg eine Dissertation anfertigte, in der gezeigt wurde, dass eine lineare Kette keine spontane Magnetisierung aufweist.

eindimenisonales Ising-Modell (in quantenmechanischer Notation)

- Hamilton-Operator:

$$\boxed{H = -J\sum_{i=1}^{N} S_i S_{i-1} - B\sum_{i=1}^{N} S_i} \quad (J, B > 0)$$

- S_i kurz für S_{iz}, lokale Spins an Plätzen eines Gitters: $i = 1, ..., N$

- Darstellung eines Spins: $S_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ (ohne Faktor $\hbar/2$!)
- mögliche Werte (Eigenwerte): $s_i = \pm 1$
- alle Observablen kommutieren ➜ "klassisches" (aber diskretes) Modell
- Energie eines Spins im Feld B:

  $-B$, falls $s_i = +1$ (Spin parallel zum Feld, $B > 0$)

  $+B$, falls $s_i = -1$ (Spin antiparallel zum Feld, $B > 0$)

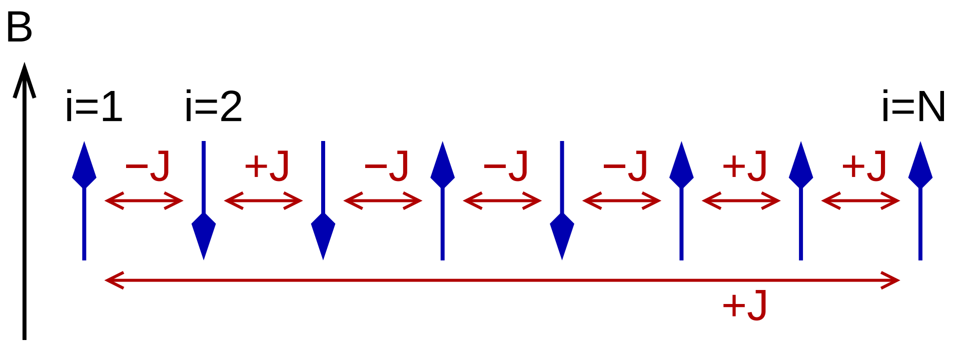
  Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn

  Wechselwirkungsenergie $(-J)$ falls $S_i S_{i-1} = +1$

  (bevorzugt parallele Spins, $J > 0$)

  GZE: $E_0 = -N(J + B)$, GZ: $s_1 = ... = s_N = +1$

  magnetisches Gesamtmoment: $M = \sum_i \langle S_i \rangle$ (allgemein: $M = -\hbar^{-1} g \mu_B \sum_i \langle S_i \rangle$)



Relevanz des Ising-Modells:

- Beschreibung magnetischer Ordnung
- Demonstrationsmodell der statistischen Physik

Lösung des Ising-Modells

- $D = 1$: lösbar (Ising, Lenz 1922-1924)
- $D = 2$: lösbar für $B = 0$ (Onsager 1944)
- $D = 3$: nicht analytisch lösbar, numerische Lösung problemlos (z.B. Monte-Carlo-Methode)
- $D = \infty$: exakt lösbar (Weiß'sche Molekularfeldtheorie, s.u.)

---

hier: $D = 1$

periodische Randbedingung: $i = 0 \Leftrightarrow i = N$

Kontrollparameter: H, M, N

kanonische Gesamtheit: $Z = Z(T, B, N)$

4.2.2 Zustandssumme

Berechnung der Zustandssumme: $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$

$$Z(T, B, N) = \sum_k e^{-\beta E_k(B,N)}$$

Mikrozustände:

$$k = (s_1, ..., s_N)$$

Energie eines Mikrozustands:

$$E_k = E_{(s_1,\dots,s_N)} = -J \sum_{i=1}^{N} s_i s_{i-1} - B \sum_{i=1}^{N} s_i$$

also:

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp\left(\beta J \sum_i s_i s_{s-1} + \beta B \sum_i s_i\right)$$

$$= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_i \exp\left(\beta J s_i s_{i-1} + \beta B s_i\right)$$

(keine einfache Faktorisierung!)

Transfermatrixmethode

$$\prod_i \exp\left(\beta J s_i s_{i-1} + \beta B s_i\right) = \prod_i \exp\left(\beta J s_i s_{i-1} + \frac{1}{2}\beta B(s_i + s_{i-1})\right) = \prod_i Q_{s_i,s_{i-1}}$$

mit Transfermatrix

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} e^{\beta J+\beta B} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J-\beta B} \end{pmatrix}$$

definiere Vektoren (Eigenvektoren von S_i zu $s_i = \pm 1$):

$$|+1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

dann ist:

$$\langle s_i|\boldsymbol{Q}|s_{i-1}\rangle = Q_{s_i,s_{i-1}}$$

und:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_1=\pm1} \cdots \sum_{s_N=\pm1} \prod_{i=1}^{N} Q_{s_i,s_{i-1}} \\ &= \sum_{s_1=\pm1} \cdots \sum_{s_N=\pm1} \langle s_N|\boldsymbol{Q}|s_{N-1}\rangle \cdots \langle s_2|\boldsymbol{Q}|s_1\rangle\langle s_1|\boldsymbol{Q}|s_N\rangle \\ &= \sum_{s_N=\pm1} \langle s_N|\boldsymbol{Q}^N|s_N\rangle \end{aligned}$$

also:

$$\boxed{Z = \mathsf{Sp}\,\boldsymbol{Q}^N}$$

$\boldsymbol{Q}$ reell und symmetrisch ➜

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{q}\boldsymbol{U}^T$$

mit $\boldsymbol{U}$ reell und orthogonal, $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T = \mathbf{1}$, $\boldsymbol{q}$ diagonal

$$Z = \mathsf{Sp}\,\boldsymbol{Q}^N = \mathsf{Sp}\,\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{q}\boldsymbol{U}^T \cdots \boldsymbol{U}\boldsymbol{q}\boldsymbol{U}^T\right) = \mathsf{Sp}\,\boldsymbol{q}^N$$

$$= \mathsf{Sp}\,\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \mathsf{Sp}\,\begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

λ_i: Eigenwerte von $\boldsymbol{Q}$

für $N \to \infty$ ist also:

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_{\max}^N \left(1 + \frac{\lambda_{\min}^N}{\lambda_{\max}^N}\right) \to \lambda_{\max}^N$$

falls $\lambda_{\max}$ nicht entartet

$$\boxed{Z = \lambda_{\max}^N}$$

Theorem von Perron und Frobenius:

sei $\boldsymbol{A}$ eine reelle $M \times M$-Matrix mit $A_{ij} > 0$ ➜

– es gibt einen nichtentarteten reellen Eigenwert $\lambda > 0$

– $\lambda > |\lambda'|$ für alle Eigenwerte $\lambda' \neq \lambda$

– $\exists\, \boldsymbol{x} = (x_1, ..., x_M)$ Eigenvektor zu λ mit $x_i > 0$

---

statt Beweis: direkte Rechnung:

$$0 = \det \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta B} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta B} - \lambda \end{pmatrix}$$

$$= \lambda^2 - \lambda \left(e^{\beta J + \beta B} + e^{\beta J - \beta B}\right) + e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}$$

also:

$$\lambda = e^{\beta J} \frac{1}{2} \left(e^{\beta B} + e^{-\beta B}\right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} e^{2\beta J} \left(e^{\beta B} + e^{-\beta B}\right)^2 - e^{2\beta J} + e^{-2\beta J}}$$

$$= e^{\beta J} \left(\cosh(\beta B) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}} \right)$$

(konsistent mit P.-F.-Theorem)

somit:

$$\boxed{Z(T, B, N) = e^{N\beta J} \left(\cosh(\beta B) + \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}} \right)^N}$$

4.2.3 Zustandsgleichungen

Ableitung der Thermodynamik, z.B.:

magnetisches Gesamtmoment

$$
\begin{aligned}
M &= \sum_{i=1}^{N} \langle S_i \rangle = \frac{1}{Z}\,\mathsf{Sp} \sum_{i=1}^{N} S_i e^{-\beta H} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial B} \ln Z \\
&= \frac{N}{\beta}\frac{1}{[\cdots]}\frac{\partial}{\partial B}\left[e^{\beta J}\left(\cosh(\beta B) + \sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}}\right)\right] \\
&= \frac{N}{\beta}\frac{e^{\beta J}}{[\cdots]}\left(\beta \sinh(\beta B) + \frac{2\cosh(\beta B)\sinh(\beta B)\beta}{2\sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}}}\right) \\
&= \frac{N}{\beta}\frac{1}{\cosh(\beta B) + \sqrt{\cdots}}\,\frac{\beta}{\sqrt{\cdots}}\,\left(\sinh(\beta B)\sqrt{\cdots} + \cosh(\beta B)\sinh(\beta B)\right) \\
&= N\frac{\cosh(\beta B) - \sqrt{\cdots}}{\cosh^2(\beta B) - \cosh^2(\beta B) + 1 - e^{-4\beta J}}\,\frac{\sinh(\beta B)\sqrt{\cdots} + \cosh(\beta B)\sinh(\beta B)}{\sqrt{\cdots}} \\
&= N\frac{\cosh^2(\beta B)\sinh(\beta B) - \sinh(\beta B)\sqrt{\cdots}^{\,2}}{(1 - e^{-4\beta J})\sqrt{\cdots}} = N\frac{-\sinh(\beta B)(e^{-4\beta J} - 1)}{(1 - e^{-4\beta J})\sqrt{\cdots}}
\end{aligned}
$$

also:

$$\boxed{M = N \frac{\sinh(\beta B)}{\sqrt{\cosh^2(\beta B) - 1 + e^{-4\beta J}}}}$$

thermische Zustandsgleichung

Diskussion für $J = 0$

idealer Paramagnet: nichtwechselwirkende Momente

$$\boxed{M(T, B, N) = N \tanh(\beta B)}$$

isotherme Suszeptibilität des idealen Paramagneten:

$$\chi = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_{T,N} \Bigg|_{B=0} = \frac{\cosh^2(\beta B) - \sinh^2(\beta B)}{\cosh^2(\beta B)} \beta \Bigg|_{B=0} = \beta = \frac{1}{k_\mathrm{B} T}$$

Curie-Gesetz

Diskussion für $J > 0$, wechselwirkende Momente

- $T \to \infty$, $\beta \to 0$:

$$M \to N \frac{\beta B}{\sqrt{1 - 1 + 1}} = N \beta B$$

also

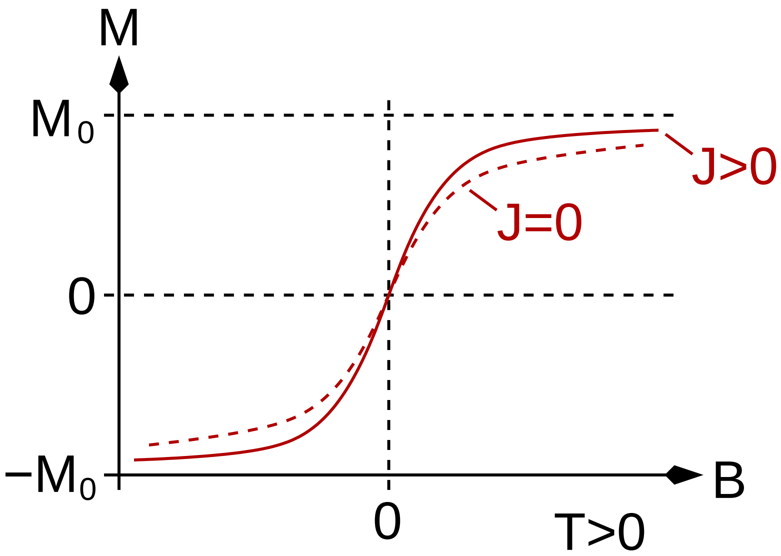
$$\boxed{\chi = \frac{1}{k_\mathrm{B} T}}$$

für $T \to \infty$ **Curie-Gesetz**

- $B \to \infty$ ➜ $M \to N \tanh(\beta B) \to N = M_0$
- für $T > 0$ ist $\lim_{B \to 0} M(T, B, N) = 0$

  Isings Resultat, **keine spontane Magnetisierung**

  Paramagnet für $T > 0$



  $M(T, B, N) = -M(T, -B, N)$

- $T \to 0$, $\beta \to \infty$ ➜ $M \to M_0$ für infinitesimales Feld

  beachte: $0 = \lim_{T \to 0} \lim_{B \to 0} M(T, B, N) \neq \lim_{B \to 0} \lim_{T \to 0} M(T, B, N) = \pm M_0$

  Ferromagnet für $T = 0$

  zweifach entarteter FM GZ $|\uparrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow, \ldots\rangle$ und $|\downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow, \ldots\rangle$

  keine makroskopisch relevante Entartung, 3.HS erfüllt

4.2.4 Korrelationsfunktion und Suszeptibilität

warum keine magnetische Ordnung?

betrachte **Spin-Spin-Korrelationsfunktion** $\langle S_i S_j \rangle$

spontaner Ferromagnetismus läge vor, falls

$$\lim_{|i-j|\to\infty} \langle S_i S_j \rangle = \text{const.} \qquad \text{für } B = 0 \ \textbf{➜ langreichweitige Ordnung}$$

es gilt:

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{s_1,\ldots,s_N} s_i s_j e^{\beta J \sum_i s_i s_{i-1}} = \frac{1}{Z} \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_N} s_i s_j \prod_{i=1}^{N} \langle s_i | \boldsymbol{Q} | s_{i-1} \rangle$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{s_i} \sum_{s_j} \sum_{s_N} \langle s_N | \boldsymbol{Q}^{N-i} | s_i \rangle s_i \langle s_i | \boldsymbol{Q}^{i-j} | s_j \rangle s_j \langle s_j | \boldsymbol{Q}^{j} | s_N \rangle$$

falls $i > j$ und mit $\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}$

mit

$$\boldsymbol{\sigma} \equiv \sum_{s_i} |s_i\rangle s_i \langle s_i| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(z-Pauli-Matrix) ist jetzt

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{s_N} \langle s_N | \boldsymbol{Q}^{N-i} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{Q}^{i-j} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{Q}^{j} | s_N \rangle = \frac{1}{Z} \,\mathsf{Sp}\left(\boldsymbol{Q}^{N-i} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{Q}^{i-j} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{Q}^{j} \right) = \frac{1}{Z} \,\mathsf{Sp}\left(\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{Q}^{i-j} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{Q}^{N-i+j} \right)$$

Diagonalisierung der Transfermatrix:

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{U} \boldsymbol{q} \boldsymbol{U}^T \qquad \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T = \boldsymbol{1}$$

mit

$$\boldsymbol{q} = \begin{pmatrix} 2\cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2\sinh(\beta J) \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

es folgt:

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \,\mathsf{Sp}\, \left(\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{U} \boldsymbol{q}^{i-j} \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{U} \boldsymbol{q}^{N-i+j} \boldsymbol{U}^T \right)$$

und mit

$$\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ist:

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \,\mathsf{Sp}\, \left(\boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{q}^{i-j} \boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{q}^{N-i+j} \right)$$

$$= \frac{1}{2^N \cosh(\beta J)^N} \,\mathsf{Sp} \begin{pmatrix} 2\sinh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2\cosh(\beta J) \end{pmatrix}^{i-j} \begin{pmatrix} 2\cosh(\beta J) & 0 \\ 0 & 2\sinh(\beta J) \end{pmatrix}^{N-(i-j)}$$

$$= \frac{1}{\cosh(\beta J)^N} \Big(\sinh^{i-j}(\beta J) \cosh^{N-(i-j)}(\beta J) + \cosh^{i-j}(\beta J) \sinh^{N-(i-j)}(\beta J) \Big)$$

$$= \tanh^{i-j}(\beta J) + \tanh^{N-(i-j)}(\beta J)$$

da $\tanh x < 1$ für $x \neq 0$, ist im Limes $N \to \infty$:

$$\boxed{\langle S_i S_j \rangle = \tanh^{(i-j)}(\beta J)}$$

homogenes System ➜ Korrelationsfunktion nur vom Abstand $d = i - j$ abhängig, schreibe

$$\langle S_i S_j \rangle = \langle S_d S_0 \rangle = \tanh^d(\beta J)$$

mit $x = \tanh(\beta J)$ ist

$$\langle S_i S_j \rangle = x^d = e^{\ln(x^d)} = e^{-\ln(1/x^d)} = e^{-d \ln(1/x)}$$

definiere die **Korrelationslänge** ξ:

$$\boxed{\xi^{-1} \equiv \ln(1/x) = \ln \coth(\beta J)}$$

dann ist

$$\boxed{\langle S_i S_j \rangle = e^{-d/\xi}}$$

die Korrelationsfunktion fällt exponentiell ab, ξ ist die charakteristische Länge

langreichweitige Ordnung wäre nur möglich für $\xi \to \infty$ (also nur für $T \to 0$)

Analyse der magnetischen Suszeptibilität

schreibe

$$H = -J\sum_{i=1}^{N} S_i S_{i-1} - \sum_{i=1}^{N} B_i S_i \qquad (J, B_i > 0)$$

dann gilt:

$$\chi = \frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial B}M = \frac{1}{N}\sum_i \frac{\partial}{\partial B_i}\sum_j \langle S_j\rangle = \frac{1}{N}\sum_{ij}\frac{\partial\langle S_j\rangle}{\partial B_i}$$

andererseits ist

$$Z = Z(T, \{B_i\}, N) \qquad F = F(T, \{B_i\}, N) = -k_\mathrm{B}T\ln Z$$

also

$$\frac{\partial F}{\partial B_i} = -k_\mathrm{B}T\frac{\partial}{\partial B_i}\ln\sum_{s_1,\ldots,s_N} e^{\beta J\sum s_{i-1}s_i + \beta\sum B_i s_i} = -k_\mathrm{B}T\frac{1}{Z}\sum_{s_1,\ldots,s_N}\beta s_i e^{-\beta H} = -\langle S_i\rangle$$

sowie:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial B_i \partial B_j} = -\frac{\partial\langle S_i\rangle}{\partial B_j} = -\frac{\partial}{\partial B_j}\frac{1}{Z}\sum_{s_1,\ldots,s_N} s_i e^{-\beta H}$$

$$= \frac{1}{Z^2}\frac{\partial Z}{\partial B_j}\sum_{s_1,\ldots,s_N} s_i e^{-\beta H} - \frac{1}{Z}\sum_{s_1,\ldots,s_N} s_i\;\beta s_j e^{-\beta H} = \langle S_i\rangle\left(-\beta\frac{\partial}{\partial B_j}F\right) - \beta\langle S_i S_j\rangle$$

also:

$$\boxed{-\frac{\partial^2 F}{\partial B_i \partial B_j} = \frac{\partial \langle S_i \rangle}{\partial B_j} = \frac{\partial \langle S_j \rangle}{\partial B_i} = \beta \left(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \right)}$$

damit lässt sich die Suszeptibilität schreiben als

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{ij} \frac{\partial \langle S_j \rangle}{\partial B_i} = \frac{1}{N} \beta \sum_{ij} \left(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \right)$$

Translationsinvarianz ausnutzen: $\langle S_i S_j \rangle = \langle S_{i-j} S_0 \rangle = \langle S_d S_0 \rangle$, Abstand $d = i - j$

$$\chi = \frac{1}{N} \beta N \sum_d \left(\langle S_d S_0 \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_0 \rangle \right) = \beta \sum_d \left(\langle S_d S_0 \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_0 \rangle \right)$$

$$\boxed{\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial B} M = \beta \sum_d \left(\langle S_d S_0 \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_0 \rangle \right)}$$

Diskussion:

- χ ist i.allg. eine endliche (und intensive) Größe:

  ein kleine Variation des äußeren Magnetfelds bewirkt eine kleine Änderung der Magnetisierung

- im paramagnetischen Zustand ist $\langle S_0 \rangle = \langle S_i \rangle = 0$

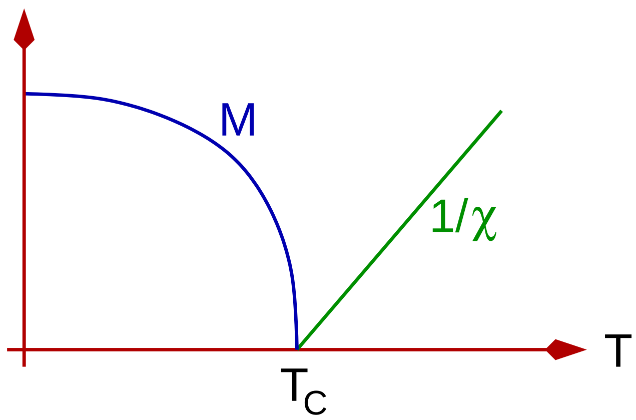
  damit χ endlich bleibt, muss $\langle S_d S_0 \rangle$ stärker als $1/d$ abfallen

  fällt in der Tat exponentiell $\langle S_d S_0 \rangle = e^{-d/\xi}$

endliche Korrelationslänge

- im ferromagnetischen Zustand ist $\langle S_0 \rangle \neq 0$
  damit χ endlich bleibt, muss $\langle S_d S_0 \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_0 \rangle \to 0$ für $d \to \infty$
  also $\langle S_d S_0 \rangle \to \langle S_0 \rangle \langle S_0 \rangle$
  unendliche Korrelationslänge
- Übergangstemperatur T_C, **Curie-Temperatur**
  für $T \to T_C$ ($T > T_C$):
  Divergenz von ξ ➜ Divergenz von χ

Erwartung:



im $D = 1$-Ising-Modell ist $T_C = 0$

---

explizite Berechnung von χ:

$$\chi = \frac{1}{N}\beta\sum_{ij}\left(\langle S_i S_j\rangle - \langle S_i\rangle\langle S_j\rangle\right) = \frac{1}{N}\beta\sum_i\langle S_i^2\rangle + 2\frac{1}{N}\beta\sum_{i>j}\langle S_i S_j\rangle$$

$$= \beta + 2\frac{1}{N}\beta\sum_i\sum_{d=1}^{\infty}\tanh^d(\beta J) = \beta\left(1 + 2\sum_{d=1}^{\infty}\tanh^d(\beta J)\right) = \beta\left(1 - 2 + 2\frac{1}{1-\tanh(\beta J)}\right)$$

$$\boxed{\chi = \beta\left(\frac{2}{1-\tanh(\beta J)} - 1\right)}$$

- $J = 0$ (idealer Paramagnet, s.o.): $\chi = 1/k_\mathrm{B}T$
  divergent bei $T = 0$ wegen GZ-Entartung $g = 2^N$
- $T \to \infty$, $\beta \to 0$: $\chi = \beta\left(\frac{2}{1 - \beta J + \mathcal{O}(\beta^3)} - 1\right) = \beta + 2J\beta^2 + \mathcal{O}(\beta^3 J^2)$
  Curie-Gesetz: $\chi \propto 1/T$ für hohe T
- $T \to 0$, $\beta \to \infty$: $\tanh(\beta J) \to 1$, $\chi \to \infty$ exponentiell
- Phasenübergang nur bei $T_C = 0$

Frage: Phasenübergänge bei endlichem T ?

4.3 Monte-Carlo-Verfahren

Situation:

A sei eine Observable

gesucht:

$$\boxed{\frac{\sum_{k=1}^{M} p_k A(k)}{\sum_{k=1}^{M} p_k} = ?}$$

k: Index, der einen diskreten Satz von Konfigurationen C_k indiziert, $k = 1, ..., M$

$A(k)$: Wert von A in k-ter Konfiguration, bekannt, für gegebenes k berechenbar

p_k: reelle Zahlen mit $p_k \geq 0$, bekannt, für gegebenes k berechenbar

Problem: M sehr groß, $\sum_k$ nicht komplett durchführbar

Interpretation der p_k als nicht normierte Wahrscheinlichkeiten:

$$\boxed{\sum_{k=1}^{M} p_k^{(\mathrm{norm.})} A(k) = \langle A \rangle = ?}$$

mit:

$$p_k^{(norm.)} = p_k / \sum_{k=1}^{M} p(k)$$

beachte: $p_k^{(norm.)} = p_k / \sum_{k=1}^{M} p(k)$ ist nicht berechenbar

---

Beispiel:

$$p_k^{(\mathrm{norm.})} = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(k)} \qquad \text{(kanonisch)}$$

mit Zustandssumme

$$Z = \sum_{k=1}^{M} e^{-\beta H(k)} = \sum_{k=1}^{M} p_k$$

und Hamilton-Funktion: $H = H(k)$

z.B.: Ising-Modell $H = \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j$

Konfiguration: $C_k = (S_1, S_2, ..., S_L)$

$k = 1, ..., M$ mit $M = 2^L$

gesucht:

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_{k=1}^{M} p_k H(k)}{\sum_{k=1}^{M} p_k} = \frac{\sum_{S_1, S_2, ..., S_L} e^{-\beta \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j} (\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j)}{\sum_{S_1, S_2, ..., S_L} e^{-\beta \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j}}$$

4.3.1 Importance sampling

sei $k_1, ..., k_N$ ein Satz von Konfigurationen, die gemäß $p_k^{(\mathrm{norm.})}$ verteilt sind, d.h.

$$\lim_{N\to\infty} \frac{n(k)}{\sum_{k=1}^M n(k)} = p_k^{(\mathrm{norm.})}$$

wobei $n(k) =$ Anzahl der k in $\{k_1, ..., k_N\}$, Häufigkeit von k in $\{k_1, ..., k_N\}$, also

$$\sum_{k=1}^M n(k) = N$$

gesucht ist: ("Scharmittel")

$$\langle A \rangle = \sum_{k=1}^M p_k^{(\mathrm{norm.})} A(k)$$

es gilt:

$$\langle A \rangle = \lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^M \frac{n(k)}{\sum_{k=1}^M n(k)} A(k) = \lim_{N\to\infty} \frac{\sum_{k=1}^M n(k) A(k)}{\sum_{k=1}^M n(k)} = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(k_i)$$

interpretiere $k_1 \to k_2 \to ... \to k_N$ als zeitliche Abfolge von N Schritten

$$\overline{A}_N \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(k_i)$$

als “Zeitmittel” über N Schritte

Approximation:

$$\boxed{\langle A\rangle \approx \overline{A}_N \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} A(k_i)} \qquad (k \text{ verteilt gemäß } p_k)$$

Qualität der Approximation?

beachte: k_i ist eine Zufallsgröße (WK: p_{k_i})

eine Funktion $F(k_1, ..., k_N)$ einer Stichprobe $k_1, k_2, ..., k_N$ ist wiederum Zufallsgröße

also: $\overline{A}_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} A(k_i) = \overline{A}_N(k_1, ..., k_N)$ ist Zufallsgröße mit

Erwartungswert von $\overline{A}_N$:

$$\langle \overline{A}_N\rangle = \sum_k p_k^{(\text{norm.})}\overline{A}_N(k_1, ..., k_N) = \sum_k p_k^{(\text{norm.})}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} A(k_i) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_k p_k^{(\text{norm.})} A(k)$$

also

$$\boxed{\langle \overline{A}_N\rangle = \langle A\rangle}$$

Varianz von $\overline{A}_N$:

$$\sigma^2_{\overline{A}_N} = \langle \overline{A}_N^2\rangle - \langle \overline{A}_N\rangle^2$$

es ist:

$$\langle \overline{A}_N^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^{N} A(k_i) A(k_j) \right\rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^{N} \langle A(k_i) A(k_j) \rangle$$

$$= \frac{1}{N^2} \left(\sum_{i \neq j} \langle A(k_i) A(k_j) \rangle + \sum_{i} \langle A(k_i)^2 \rangle \right)$$

$$= \frac{1}{N^2} \left(N(N-1) \langle A \rangle \langle A \rangle + \sum_{i} \langle A^2 \rangle \right) = \frac{N-1}{N} \langle A \rangle^2 + \frac{1}{N} \langle A^2 \rangle$$

falls die k_i voneinander unabhängig sind !

also:

$$\sigma^2_{\overline{A}_N} = \langle \overline{A}_N^2 \rangle - \langle \overline{A}_N \rangle^2 = \frac{N-1}{N} \langle A \rangle^2 + \frac{1}{N} \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

und

$$\boxed{\sigma^2_{\overline{A}_N} = \frac{1}{N} \sigma^2_A}$$

σ^2_A ist fest, für $N \to \infty$ kann der Fehler in der Berechnung von $\langle A \rangle \approx \overline{A}_N$ beliebig klein gemacht werden !

Bemerkung:

nach dem ZGWS ist für $N \to \infty$:

$$\rho(\overline{A}_N) = \sqrt{\frac{N}{2\pi\sigma_A^2}} \exp\left(-\frac{(A - \langle A\rangle)^2}{2\sigma_A^2/N}\right)$$

$\sigma_{\overline{A}_N}$ ist:

– der **statistischer Fehler** der Berechnung von $\langle A\rangle$

– die Breite der Verteilung von $\overline{A}_N$

– die Standardabweichung vom Mittelwert von $\overline{A}_N$

---

simple sampling vs. importance sampling

$$\langle A\rangle = \sum_{k=1}^{M} p_k^{(\mathrm{norm.})} A(k) = ?$$

simple sampling

wähle Konfigurationen $k_1, k_2, \ldots$ mit WK $1/M$ und approximiere

$$\langle A\rangle \approx \overline{(pA)}_N \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} p_{k_i}^{(\mathrm{norm.})} A(k_i)$$

Fehler(quadrat):

$$\sigma^2_{\overline{(pA)}_N} = \frac{1}{N}\sigma^2_{pA}$$

ist z.B. (bestenfalls) $\sigma_A = 0$, dann folgt $\sigma^2_{pA} = A^2\sigma^2_p$

➜ Integrationsfehler bestimmt durch σ_p !

Hauptproblem:

Werden Konfigurationen lediglich mit gleicher WK betrachtet, so liefern fast alle k_i kaum einen nennenswerten Beitrag, falls $p_k A_k$ stark gepeakt ist (und das ist typisch)!

$$\langle A\rangle = \sum_{k=1}^{M} p_k^{(\text{norm.})} A(k) = ?$$

importance sampling

wähle Konfigurationen $k_1, k_2, \ldots$ mit WK $p_k^{(\text{norm.})}$ und approximiere

$$\langle A\rangle \approx \overline{A}_N \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} A(k_i)$$

Fehler(quadrat):

$$\sigma^2_{\overline{A}_N} = \frac{1}{N}\sigma^2_A$$

➜ Integrationsfehler nur durch σ_A bestimmt (optimal)

Die k_i sind gemäß p_k verteilt, so dass viele k_i mit nicht nahezu nichtverschwindendem p_k vorkommen und endliche Beiträge liefern!

Problem:

Wie generiert man eine Stichprobe $k_1, ..., k_N$
einer vorgegebenen nichtnormierten Verteilung p_k ?

4.3.2 Markov-Prozesse

stochastischer Prozess:

Startpunkt: (normierte) Wahrscheinlichkeiten $p_k^{(0)}$ für Konfigurationen $k = 1, ..., M$

Iteration ("Zeitschritte")

$$p_k^{(0)} \to p_k^{(1)} \to p_k^{(2)} \to \cdots \qquad \text{d.h.} \qquad \boldsymbol{p}^{(0)} \to \boldsymbol{p}^{(1)} \to \boldsymbol{p}^{(2)} \to \cdots$$

gemäß

$$p_k^{(i)} = \sum_l p_l^{(i-1)} T_{lk}$$

mit **Übergangswahrscheinlichkeit** (bedingte WK)

$T_{lk} = P(\text{System z.Zt. } i \text{ im Zustand } k \,|\, \text{System z.Zt. } i-1 \text{ im Zustand } l)$

also:

$$\boldsymbol{p}^{(n)} = \boldsymbol{p}^{(n-1)}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{p}^{(n-2)}\boldsymbol{T}^2 = \cdots = \boldsymbol{p}^{(0)}\boldsymbol{T}^n$$

wobei $\boldsymbol{p}^{(i)} = (p_1^{(i)}, p_2^{(i)}, ..., p_M^{(i)})$

Markov-Prozess: jeder Schritt hängt nur vom vorherigen ab (kein "Gedächtnis")

offensichtlich gilt:

$$T_{kl} \geq 0$$

$$\sum_{l=1}^{M} T_{kl} = 1$$

eine Matrix $\boldsymbol{T}$ mit diesen Eigenschaften heißt **stochastische Matrix**

für eine stochastische Matrix gilt:

- $p_k^{(i)} \geq 0, \qquad \sum_k p_k^{(i)} = 1$ falls $p_k^{(i-1)} \geq 0, \qquad \sum_k p_k^{(i)} = 1$
- $\boldsymbol{T}^n$ ist stochastisch denn $\sum_l (T^2)_{kl} = \sum_l \sum_m T_{km} T_{ml} = 1$ etc.
- $\boldsymbol{T}$ besitzt den Eigenwert 1 denn $\sum_l T_{kl} v_l = 1 \cdot v_k$ falls $v_k = 1$ für alle k

---

Theorem von Perron und Frobenius :

sei $\boldsymbol{T}$ eine reelle $M \times M$-Matrix mit $T_{kl} > 0$, dann gilt:

es gibt einen nichtentarteten reellen Eigenwert $\lambda > 0$

mit $\lambda > |\lambda'|$ für alle Eigenwerte $\lambda' \neq \lambda$

falls zusätzlich $\sum_l T_{kl} = 1$, gilt $\lambda = 1$

---

für große Zeiten

$$\boldsymbol{T}^\infty \equiv \lim_{n\to\infty} \boldsymbol{T}^n$$

Diagonalisierung:

$$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{S} \qquad \text{mit } \boldsymbol{D} = \text{diag}\,(1, \lambda_2, ..., \lambda_M)$$

damit ist:

$$\boldsymbol{T}^\infty = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{D}^\infty\boldsymbol{S}$$

wegen $\lambda_k^\infty = 0$ für $k = 2, ..., M$ ist jetzt:

$$\boldsymbol{D}^\infty = \text{diag}\,(1, 0, ..., 0)$$

also:

$$T_{kl}^\infty = \sum_{mn} S_{km}^{-1} D_{mn}^\infty S_{nl} = S_{k1}^{-1} S_{1l}$$

$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{S}$ ➜ Spalten von $\boldsymbol{S}^{-1}$ sind Eigenvektoren von $\boldsymbol{T}$

1. Spalte von $\boldsymbol{S}^{-1}$: Eigenvektor zum Eigenwert 1, Eigenwert 1 nicht entartet, also

$$S_{k1}^{-1} = \text{const.}$$

also:

$$\boxed{T_{kl}^{\infty} = t_l} \quad \text{(mit } \sum_{l=1}^{M} t_l = 1\text{)}$$

$\boldsymbol{T}^{\infty}$ besteht aus identischen Zeilen $\boldsymbol{t}$

dies ist ein allgemeines Resultat für stochastische Matrizen $\boldsymbol{T}$ mit $T_{kl} > 0$

es gilt offensichtlich auch, falls $\exists i_0$ mit $T_{kl}^{i_0} > 0$

d.h. jede Konfiguration kann nach gewisser “Zeit” mit endlicher WK von jeder anderen erreicht werden

eine solche stochastische Matrix heißt **ergodisch**

Beispiel:

$$\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{nicht ergodisch}$$

Beispiel:

$$\boldsymbol{T} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{ergodisch}$$

denn: $T^2_{ij} > 0 \; \forall i, j$

$$\boldsymbol{T}^\infty = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{ergodisch}$$

---

damit konvergiert die Folge der gemischten Zustände

$$\boldsymbol{p}^{(0)} \to \boldsymbol{p}^{(1)} = \boldsymbol{p}^{(0)}\boldsymbol{T} \to \cdots \to \boldsymbol{p}^{(0)}\boldsymbol{T}^\infty$$

wegen $\sum_k p_k^{(0)} = 1$ ist:

$$\boldsymbol{p}^{(0)}\boldsymbol{T}^\infty = \boldsymbol{p}^{(0)}\begin{pmatrix} \boldsymbol{t} \\ \boldsymbol{t} \\ . \\ . \\ \boldsymbol{t} \end{pmatrix} = \boldsymbol{t}$$

unabhängig vom Anfangs- wird stets der gleiche Endzustand $\boldsymbol{t}$ erreicht

es gilt:

$$\boldsymbol{t} = \boldsymbol{p}^{(0)}\boldsymbol{T}^\infty = \boldsymbol{p}^{(0)}\boldsymbol{T}^\infty\boldsymbol{T}$$

also:

$$\boxed{\boldsymbol{t} = \boldsymbol{t}\boldsymbol{T}}$$

$\boldsymbol{t}$ ist **stationärer Punkt** des Markov-Prozesses

---

betrachte Markov-Kette

$$k_0 \to k_1 \to k_2 \to \ldots$$

mit $\boldsymbol{T}$ als Übergangsmatrix und k_0 als Startkonfiguration

es ist:

$$p_k^{(0)} = 1 \qquad \text{falls } k = k_0 \text{ und} \qquad p_k^{(0)} = 0 \qquad \text{falls } k \neq k_0$$

nach einem Schritt ist daher:

$$p_k^{(1)} = \sum_{k'} p_{k'}^{(0)} T_{k'k} = T_{k_0 k}$$

nach zweitem Schritt ist:

$$p_k^{(2)} = \sum_{k'k''} p_{k''}^{(0)} T_{k''k'} T_{k'k} = T_{k_0 k}^2$$

nach N Schritten ist:

$$p_k^{(N)} = T_{k_0 k}^N$$

nach einer "Thermalisierungsphase" (strikt für $N \to \infty$) ist:

$$p_k^{(\infty)} = T_{k_0 k}^{\infty} = t_k$$

d.h. asymptotisch wird die Konfiguration k mit WK (relativen Häufigkeit) t_k in der Markov-Kette gefunden

---

Markov-Ketten-Monte-Carlo-Verfahren

- wähle k_0 beliebig
- konstruiere eine stochastische und ergodische Matrix $\boldsymbol{T}$, so dass $T_{kl}^{\infty} = p_l^{(\text{norm.})}$, wobei $p_k^{(\text{norm.})}$ die (bis auf die Norm) vorgegebene Wahrscheinlichkeitsverteilung ist
- konstruiere die Markov-Kette

$$k_0 \to k_1 \to k_2 \to \ldots$$

- berechne

$$\langle A \rangle \approx \overline{A}_N \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} A(k_i)$$

- N muss so groß sein, dass Thermalisierung erreicht ist!

Beispiel:

$\boldsymbol{T}$ sei die zur Verteilung

$$p_k^{(\mathrm{norm.})} = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(k)} \qquad Z = \sum_k e^{-\beta H(k)}$$

gehörige Übergangsmatrix, d.h.

$$\boldsymbol{p}^{(\mathrm{norm.})} \boldsymbol{T} = \boldsymbol{p}^{(\mathrm{norm.})}$$

dann gilt: ("Scharmittel = Zeitmittel")

$$\langle A \rangle = \sum_{k=1}^{M} p_k^{(\mathrm{norm.})} A(k) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} A(k_i)$$

wobei

$$k_1 \to k_2 \to \ldots$$

eine mittels $\boldsymbol{T}$ konstruierte, ergodische Markov-Kette ist

4.3.3 Metropolis-Algorithmus

wie bestimmt man $\boldsymbol{T}$ für (bis auf die Norm) gegebenes $p_k^{(\mathrm{norm.})}$?

gesucht: $\boldsymbol{T}$ mit

– $\boldsymbol{T}$ stochastisch ($T_{ij} \geq 0$ und $\sum_{j=1}^{M} T_{ij} = 1$)

– $\boldsymbol{T}$ ergodisch ($\exists n_0 : \; T_{ij}^{n_0} > 0$)

– $\boldsymbol{p}^{(\mathrm{norm.})}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{p}^{(\mathrm{norm.})}$ mit $\boldsymbol{p}^{(\mathrm{norm.})}$ gegeben und $\sum_k p_k^{(\mathrm{norm.})} = 1$

Behauptung:

$$\boxed{p_i^{(\mathrm{norm.})} T_{ij} = p_j^{(\mathrm{norm.})} T_{ji}}$$ **detailled balance**

ist eine hinreichende Bedingung!

beachte: die detailled-balance-Bedingung ist äquivalent zu:

$$\boxed{p_i T_{ij} = p_j T_{ji}}$$ **detailled balance**

mit $p_i = \text{const.} \times p_i^{(\mathrm{norm.})}$

➜ die Norm muss nicht berechnet werden, um ein $\boldsymbol{T}$ zu bestimmen!

Beweis:

$$(\boldsymbol{pT})_j = \sum_i p_i T_{ij} = \sum_i p_j T_{ji} = p_j \sum_i T_{ji} = p_j$$

also ist $\boldsymbol{p}$ der nichtentartete Eigenvektor von $\boldsymbol{T}$ zum Eigenwert 1

d.h. $\boldsymbol{p}$ ist (nach Normierung) die WK-Verteilung, die durch eine Markov-Kette mittels $\boldsymbol{T}$ generiert wird

---

eine Möglichkeit zur Festlegung von $\boldsymbol{T}$: **Metropolis-Algorithmus**

$$\boxed{T_{ij} = M_{ij}A_{ij} + \left(1 - \sum_k M_{ik}A_{ik}\right)\delta_{ij}}$$

d.h.

$$\boxed{T_{i\neq j} = M_{ij}A_{ij} \qquad T_{ii} = 1 - \sum_{k\neq i} M_{ik}A_{ik} = 1 - \sum_{k\neq i} T_{ik}}$$

mit M_{ij} symmetrische **Vorschlags-WK** : (Vorschlag für einen "move")

$$M_{ij} \geq 0 \qquad \sum_j M_{ij} = 1 \qquad M_{ij} = M_{ji}$$

und A_{ij} **Akzeptanz-WK** : (nicht normiert)

$$\boxed{A_{ij} = \min(1, p_j/p_i)}$$

Beweis:

$\boldsymbol{T}$ stochastisch?

$$T_{ij} \geq 0 \qquad \sum_j T_{ij} = 1 \qquad ✔$$

detailled balance?

$\boxed{p_j < p_i}$ ➜ $i \neq j,\ A_{ij} = p_j/p_i,\ A_{ji} = 1$

$$\frac{T_{ij}}{T_{ji}} = \frac{M_{ij}A_{ij}}{M_{ji}A_{ji}} = \frac{A_{ij}}{A_{ji}} = \frac{p_j/p_i}{1} = \frac{p_j}{p_i}$$

$\boxed{p_j > p_i}$ ➜ $i \neq j$, $A_{ij} = 1$, $A_{ji} = p_i/p_j$

$$\frac{T_{ij}}{T_{ji}} = \frac{M_{ij}A_{ij}}{M_{ji}A_{ji}} = \frac{A_{ij}}{A_{ji}} = \frac{1}{p_i/p_j} = \frac{p_j}{p_i}$$

$\boxed{p_j = p_i}$ ➜ $A_{ij} = A_{ji} = 1$, $T_{ij} = M_{ij} + (1 - \sum_k M_{ik})\delta_{ij} = T_{ji}$ ✔

$\boldsymbol{T}$ ergodisch?

abhängig von $\boldsymbol{M}$ (✔)

Beispiel:

Ising-Modell

$$H = -J \sum_{xx'}^{\text{n.n.}} s_x s_{x'} - B \sum_x s_x$$

mit $x = 1, ..., L$, L: Anzahl Gitterplätze

Konfiguration, Mikrozustand $k = (s_1, ..., s_L)$, Anzahl Mikrozustände: $M = 2^L$

einzelner Spin-Flip:

$$M^{(i)}_{(s_1,...,s_L),(s'_1,...,s'_L)} = \delta_{s_1 s'_1} \cdots \delta_{s_{i-1}s'_{i-1}} \delta_{-s_i s'_i} \delta_{s_{i+1}s'_{i+1}} \cdots \delta_{s_L s'_L}$$

$\boldsymbol{M}^{(i)}$ ist stochastisch und symmetrisch und ergodisch

Durchlauf durch gesamtes Gitter, **sweep**

$$\boldsymbol{M} = \prod_{i=1}^{L} \boldsymbol{M}^{(i)}$$

Produkt stochastischer Matrizen ➜ $\boldsymbol{M}$ stochastisch

$\boldsymbol{M}^{(i)}$ symmetrisch und paarweise kommutativ ➜ $\boldsymbol{M}$ symmetrisch

nach 1 sweep kann jede Konfiguration von jeder erreicht werden ➜ Prozess ergodisch

---

Approximation: $\langle A \rangle \approx \overline{A}_N \equiv \dfrac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} A(k_i)$ (k verteilt gemäß p_k) mit Fehler(quadrat):

$$\boxed{\sigma^2_{\overline{A}_N} = \frac{1}{N} \sigma^2_A}$$

- nur korrekt bei unabhängigen “Messungen”!
- lokale Updates (z.B. einzelner Spin-Flip) ändern die Konfiguration nur wenig
- aufeinanderfolgende Konfigurationen in der Markov-Kette sind daher stark korreliert
- der Fehler wird unterschätzt, da zuviele Messungen an nahezu gleichen Konfigurationen durchgeführt werden

Ausweg **binning**: bei N gegebenen Daten definiere

$$\overline{A}_j \equiv \frac{1}{n_b} \sum_{i=(j-1)n_b+1}^{jn_b} A(k_i)$$

für große n_b sind die $\overline{A}_j$ unabhängig, also

$$\sigma^2_{\overline{A}} = \frac{n_b}{N}\sigma^2_A$$

mit N/n_b: Anzahl der bins

4.4 Mean-Field-Theorie

4.4.1 Grundkonzept

D-dimensionales hyperkubisches Gitter: jeder Platz hat $q = 2D$ n.N.

D-dimensionales Ising-Modell:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} S_i S_j - B \sum_i S_i$$

beachte:

$$\frac{1}{N} \left\langle -\frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} S_i S_j \right\rangle = -\frac{J}{2} \frac{1}{N} \sum_{ij}^{n.N.} \langle S_i S_j \rangle = Jq \times \mathcal{O}(1) \to \infty$$

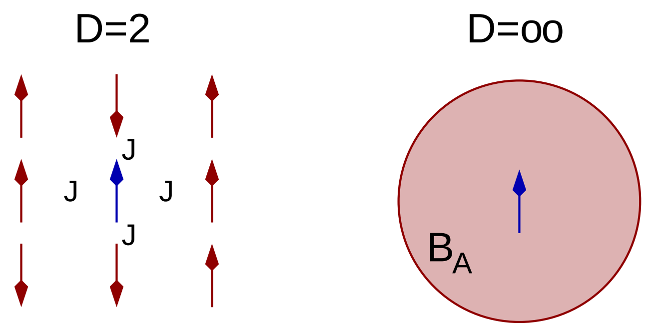
für $D, q \to \infty$, während

$$\frac{1}{N} \left\langle -B \sum_i S_i \right\rangle = -B \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = B \times \mathcal{O}(1)$$

daher **Skalierung**:

$$\boxed{J = \frac{J^*}{q} \qquad J^* = \text{const.}} \qquad \text{für } D, q \to \infty$$

Idee der Molekularfeld-Theorie:



- D endlich: Spin am Gitterplatz i "sieht" lokales Feld

$$J \sum_{j}^{n.N.} S_j$$

➜ Ising-Hamiltonian $\sum_i S_i \times J \sum_j^{n.N.} S_j$

- Feld fluktuiert von Spin-Konfiguration zu Spin-Konfiguration

- Limes $q \to \infty$:
  Unterdrückung der Fluktuationen

- Spin am Gitterplatz i "sieht" globales Feld

$$B_A$$

➜ vereinfachter Hamiltonian $\sum_i S_i \times B_A$

4.4.2 Mean-Field-Gleichung

es gilt $(i \neq j)$:

$$S_i S_j = S_i \langle S_j \rangle + S_j \langle S_i \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + F$$

mit Fluktuationsterm

$$F = (S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle)$$

Molekularfeld-Näherung

exakt für $D \to \infty$

damit ist $H \to H_{\mathrm{MF}}$:

$$H_{\mathrm{MF}} = -\frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} 2 \langle S_j \rangle S_i + \frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \langle S_j \rangle \langle S_i \rangle - B \sum_i S_i$$

$$= -\sum_i \left(J \sum_j^{n.N.(i)} \langle S_j \rangle + B \right) S_i + \frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \langle S_j \rangle \langle S_i \rangle$$

$$= -\sum_i \left(B_i^{(A)} + B \right) S_i + \frac{J}{2} \sum_{ij}^{n.N.} \langle S_j \rangle \langle S_i \rangle$$

mit **Austauschfeld**

$$\boxed{B_i^{(A)} \equiv J \sum_j^{n.N.(i)} \langle S_j \rangle}$$

Translationsinvarianz:

$$\langle S_i \rangle = m_i = m \qquad \forall i$$

mit der Koordinationszahl q ist:

$$\boxed{H_{\mathrm{MF}} = -\left(B_A + B\right) \sum_i S_i + \frac{J}{2} N q m^2}$$

und

$$\boxed{B_A = qJm}$$

Diskussion:

- MFT: Gitter-Modell ➜ atomares Modell
- mikroskopische Begründung der Weißschen Theorie
- Selbstkonsistenz: m ➜ B_A ➜ H_{MF} ➜ F_{MF} ➜ m

Auswertung der MFT:

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F_{\mathrm{MF}}}{\partial B}$$

(denn Kopplungsterm: $-B\sum_i S_i$)

Berechnung von Z_{MF}:

$$\begin{aligned}
Z_{\mathrm{MF}} &= \mathsf{Sp}\, e^{-\beta H_{\mathrm{MF}}} \\
&= \sum_{S_1,S_2,\cdots} \langle S_1, S_2, \cdots | e^{\beta \sum_i (B_A+B) S_i} | S_1, S_2, \cdots \rangle e^{-\beta NqJm^2/2} \\
&= e^{-\beta NqJm^2/2} \sum_{S_1,S_2,\cdots} \prod_i e^{\beta (B_A+B) S_i} \\
&= e^{-\beta NqJm^2/2} \prod_i \sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta (B_A+B) S_i} \\
&= e^{-\beta NqJm^2/2} (e^{\beta(B_A+B)} + e^{-\beta(B_A+B)})^N
\end{aligned}$$

es folgt:

$$\begin{aligned}
F_{\mathrm{MF}} &= -T \ln Z_{\mathrm{MF}} \\
&= -NT \ln \left(e^{\beta(B_A+B)} + e^{-\beta(B_A+B)} \right) + NqJm^2/2
\end{aligned}$$

also:

$$m = -\frac{1}{N}\frac{\partial F_{\mathrm{MF}}}{\partial B} = T\beta\, \frac{e^{\beta(B_A+B)} - e^{-\beta(B_A+B)}}{e^{\beta(B_A+B)} + e^{-\beta(B_A+B)}}$$

Mean-Field-Gleichung:

$$\boxed{m = \tanh\left(\beta\left(qJm + B\right)\right)}$$

Selbstkonsistenz-Gleichung für m

4.4.3 Magnetischer Phasenübergang

$T \to 0, \beta \to \infty : m \to \pm 1$ Sättigungsmoment

$T \to \infty, \beta \to 0 : m \to 0$ paramagnetische Lösung

$B = 0$:

$m = 0$ ist Lösung, paramagnetische Phase

$m \neq 0$: Ferromagnetismus ?

$m \to 0$, $\tanh x = x - \frac{1}{3}x^3 + \mathcal{O}(x^5)$

$m = \beta_C q J m$

$$\boxed{T_C = qJ} \qquad \text{(Curie-Temperatur)}$$

➜ typisches MF-Resultat: $T_C \propto J, q$

$m = \beta q J m - \frac{1}{3}(\beta q J m)^3$

$$m^2 = 3\frac{T^2}{T_C^2}\frac{T_C - T}{T_C}$$

$$\boxed{T \to T_C: \qquad m \propto \sqrt{\frac{T_C - T}{T_C}}}$$

kritischer Exponent: $\beta = 1/2$

➜ charakteristisch für MF!

($m = t^\beta$, $t = (T_C - T)/T_C$, $\beta \approx 0.325$ 3D-Ising)

$B > 0$:

$T > T_C$, $B \to 0$ ➜ $m \to 0$ ➜ x klein in $\tanh x$:

$$m = \beta q J m + \beta B$$

$$m = \beta B \frac{1}{1 - \beta q J} = B \frac{1}{T - T_C}$$

$$\boxed{\frac{\partial m}{\partial B} = \frac{1}{T - T_C}}$$

Curie-Weiß-Verhalten der Suszeptibilität

➜ kritischer Exponent $\gamma = 1$ ($\chi = (-t)^{-\gamma}$, $\gamma = 1.2402$ 3D Ising)

4.4.4 Langreichweitige Wechselwirkung

betrachte Ising-Modell

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} J_{ij} S_i S_j - B \sum_i S_i$$

mit symmetischer, positiv semidefiniter $N \times N$ Matrix $\boldsymbol{J}$

Diagonalisierung:

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{J} \boldsymbol{U}, \qquad \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{U} = \mathbf{1}$$

$\boldsymbol{j}$ Diagonalmatrix mit Elementen $J_q \geq 0$, $q = 1, ..., N$

beachte:
$J_q \geq 0 \quad \forall q$ kann mit $J_{ii} = J_0 > 0$ in H sichergestellt werden
(liefert nur additive thermodynamisch irrelevante Konstante in H)

definiere:

$$S_q = \sum_i U_{qi} S_i$$

damit ist:

$$\sum_i S_i = \sum_i \sum_q U^T_{iq} S_q = \sum_q \sigma_q S_q \qquad \text{wobei } \sigma_q = \sum_i U_{qi}$$

und

$$\boxed{H = -\frac{1}{2}\sum_{q=1}^{N} J_q S_q^2 - B \sum_q \sigma_q S_q}$$

Zustandssumme:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp\left(\frac{1}{2}\beta \sum_q J_q S_q^2 + \beta B \sum_q \sigma_q S_q\right)$$

es ist:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_q^{J_q>0} \exp\left(\frac{1}{2}\beta J_q S_q^2 + \beta B \sigma_q S_q\right) \prod_q^{J_q=0} \exp\left(\beta B \sigma_q S_q\right)$$

Gauß-Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$$

und für beliebiges y:

$$\int dx\ e^{-(x-y)^2} = \sqrt{\pi}$$

also:

$$e^{y^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx\ e^{-x^2+2xy}$$

Hubbard-Stratonovich-Transformation:

$$\boxed{e^{ay^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx\ e^{-x^2+2\sqrt{a}xy}}$$

beachte:
statt quadratischer (links) nur lineare y-Abhängigkeit (rechts) im Exponenten
Idee: $S_q^2 \to S_q$, Ausführen der S_i-Summen möglich
zu zahlender "Preis": $\int dx$

Anwendung:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \prod_{q}^{J_q>0} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx_q \exp\left(-x_q^2 + 2\sqrt{\beta J_q/2}\, x_q S_q + \beta B \sigma_q S_q\right) \prod_{q}^{J_q=0} \exp\left(\beta B \sigma_q S_q\right)$$

- Spin-Summen können jetzt ausgeführt werden
- aber evtl. hochdimensionales Integral
- Modell "separabel" bei endlich vielen Eigenwerten mit $J_q > 0$

Beispiel: Ising-Modell mit $J_{ij} = J/N$ für alle i, j

Langreichweitige Wechselwirkung, dimensionsloses Modell

Eigenwerte der $\boldsymbol{J}$-Matrix:

$J_q = J$ für $q = 1$

$J_q = 0$ für $q = 2, ..., N$

Eigenvektor zu $J_q = J$ (Komponenten $i = 1, ..., N$):

$$U_{1i} = 1/\sqrt{N} \qquad (\rightarrow \sigma_{q=1} = \sqrt{N})$$

es ist:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx \exp\left(-x^2 + \sqrt{2\beta J}\; x S_{q=1} + \beta B \sqrt{N} S_{q=1}\right) \prod_{q \geq 2} \exp\left(\beta B \sigma_q S_q\right)$$

$$= \sum_{\{S_i\}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx \exp\left(-x^2 + \sqrt{2\beta J}\; x S_{q=1}\right) \exp\left(\beta B \sum_{q=1}^{N} \sigma_q S_q\right)$$

$$= \sum_{\{S_i\}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int dx \exp\left(-x^2 + \sqrt{2\beta J}\; x \sum_i \frac{1}{\sqrt{N}} S_i + \beta B \sum_i^{N} S_i\right)$$

Skalierung $x \rightarrow \sqrt{\beta N}\, x$:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \sqrt{\frac{\beta N}{\pi}} \int dx\; \exp\left(-N\beta x^2 + (\beta\sqrt{2J}\; x + \beta B) \sum_i S_i\right)$$

$$= \sqrt{\frac{\beta N}{\pi}} \int dx\; \exp\left(-N\beta x^2\right) \sum_{\{S_i\}} \prod_i \exp\left((\beta\sqrt{2J}\; x + \beta B) S_i\right)$$

Ausführen der Spin-Summen:

$$Z = \sqrt{\frac{\beta N}{\pi}} \int dx \, \exp\left(-N\beta x^2\right) \prod_i 2\cosh\left(\beta\sqrt{2J}\, x + \beta B\right)$$

$$= \sqrt{\frac{\beta N}{\pi}} \int dx \, \exp\left[-N\left(\beta x^2 - \ln 2\cosh(\beta\sqrt{2J}\, x + \beta B)\right)\right]$$

Auswertung des Integrals für $N \to \infty$ mit Sattelpunktsmethode:

$$\boxed{\int dx \, \exp\left(N g(x)\right) \approx \exp\left(N g(x_0)\right) \qquad \text{mit} \quad g'(x_0) = 0}$$

also:

$$0 = \frac{d}{dx}\left(\beta x^2 - \ln 2\cosh(\beta\sqrt{2J}\, x + \beta B)\right)_{x=x_0}$$

$$2\beta x_0 = \tanh(\beta\sqrt{2J}\, x_0 + \beta B)\, \beta\sqrt{2J}$$

$$2\frac{x_0}{\sqrt{2J}} = \tanh(\beta\sqrt{2J}\, x_0 + \beta B)$$

mit $x_0 \equiv \sqrt{J/2}\, m$ ist

$$\boxed{m = \tanh(\beta J m + \beta B)}$$

Diskussion:

- Selbstkonsistenzgleichung der Molekularfeldtheorie
- Sattelpunktsmethode exakt falls $g(x)$ für $N \to \infty$ unabhängig von N

- Phasenübergang bei $T_C = J$
- Ferromagnetismus in jeder Dimension, falls Wechselwirkung hinreichend langreichweitig