## Vorbemerkung

Dies ist ein abgegebener Übungszettel aus dem Modul physik521.

Dieser Übungszettel wurde nicht korrigiert. Es handelt sich lediglich um meine Abgabe und keine Musterlösung.

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf http://martin-ueding.de/de/university/bsc_physics/physik521/ gefunden werden.



[disclaimer]

# physik521 – Übung 13

Martin Ueding
mu@martin-ueding.de

Paul Manz

Lino Lemmer
l2@uni-bonn.de

2014-07-07

## 1 Ising Modell

### 1.1 Molekularfeld-Näherung

**Kanonische Zustandssumme** Wir berechnen die kanonische Zustandssumme. Wir summieren dazu über alle Zustände $|n\rangle$ in der Spur. Diese Zustände bestehen aus den verschiedenen Spinkonfigurationen der einzelnen Teilchen. Somit haben wir:

$$Z_{\mathrm{C}} = \operatorname{Tr}\left[\exp[-\beta \hat{H}]\right]$$

Wir setzen den Hamiltonoperator explizit ein:

$$= \operatorname{Tr}\left[\exp\left[-\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right]\right].$$

Wir benutzen als Basis die Spinzustände und schreiben die Spur somit als $N$ Summen:

$$= \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[-\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right].$$

Die Summe in der Exponentialfunktion ziehen wir raus in ein Produkt. Da wir über $N$ Einträge innerhalb der Exponentialfunktion summieren und außerhalb ebenfalls über $N$ Einträge summieren, können wir dies in ein Produkt zusammenfassen:

$$= \prod_{i=1}^{N} \sum_{\sigma_i=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[-\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\sigma_i\right].$$

Das Produkt können wir als einfache Potenz schreiben, da der Faktor invariant gegenüber $i$ ist. Diese Summe können wir dann auch noch ausführen.

$$
\begin{aligned}
&= \left(\exp\left[\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right]\right)^N \\
&= 2^N \cosh^N\left[\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right]
\end{aligned}
$$

**Erwartungswert des Spins**

$$
\begin{aligned}
\langle\sigma_j\rangle &= \frac{1}{Z_\mathrm{C}} \operatorname{Tr}[\sigma_j W] \\
&= \frac{1}{Z_\mathrm{C}} \prod_{i=1}^{N} \sum_{\sigma_i=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[-\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\sigma_i\right]\sigma_j
\end{aligned}
$$

Wir sind nur an dem Erwartungswert von einem Spin interessiert. Daher setzen wir, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, hier $j = 1$. Aus dem Produkt ziehen wir den Anteil für $i = 1$ heraus. Die Zustandssumme war bereits faktorisiert, so dass wir diese ebenfalls aufteilen können:

$$
= \frac{1}{Z_{\mathrm{C},1}} \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \sigma_1 \exp\left[-\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\sigma_1\right] \frac{1}{Z_{\mathrm{C},1}^{N-1}} \prod_{i=2}^{N} \sum_{\sigma_i=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[-\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\sigma_i\right].
$$

Vergleicht man den letzten Teil mit der Berechnung der Zustandssumme, sieht man, dass dort $Z_{\mathrm{C},1}^{N-1}$ herauskommt, sich mit dem gleichen Faktor im Nenner kürzt. Es bleibt also:

$$
= \frac{1}{Z_{\mathrm{C},1}} \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \sigma_1 \exp\left[-\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\sigma_1\right].
$$

Ab hier führen wir die Summe aus, setzen $Z_{\mathrm{C},1}$ ein und vereinfachen mit trigonometrischen Funktionen.

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\frac{1}{Z_{\mathrm{C},1}}\left(\exp\left[\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right] - \exp\left[-\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right]\right) \\
&= \frac{1}{2}\frac{\exp\left[\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right] - \exp\left[-\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right]}{\exp\left[\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right]} \\
&= \frac{1}{2}\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)\right]
\end{aligned}
$$

**Grafische Diskussion** Für $B = 0$ gilt

$$
\langle\sigma\rangle = \frac{1}{2}\tanh\left[\frac{1}{2}\beta Jq\langle\sigma\rangle\right].
$$

Wir definieren $x := \beta Jq\langle\sigma\rangle/2$ und stellen dies entsprechend nach $\langle\sigma\rangle$ um. Somit erhalten wir als dimensionslose Funktionsvorschrift:

$$\frac{4k_\mathrm{B}T}{Jq}x = \tanh[x].$$

Dies haben wir in Abbildung 1 grafisch dargestellt. Die kritische Temperatur ist dann erreicht, wenn die Steigung der Geraden eins wird. Daher können wir die kritische Temperatur angeben als:

$$T_\mathrm{C} = \frac{Jq}{4k_\mathrm{B}}.$$

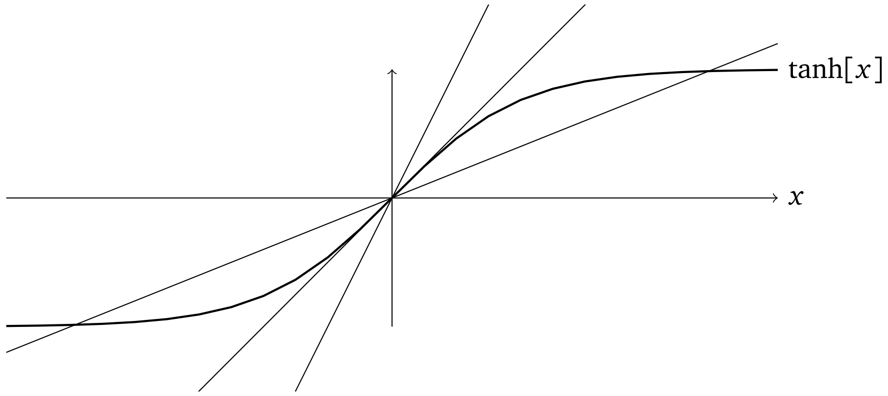


Abbildung 1: Schnittpunkte von $\tanh[x]$ mit $\frac{4k_\mathrm{B}T}{Jq}x$, wobei $\frac{4k_\mathrm{B}T}{Jq}$ die Werte 0,4, 1 und 2 annimmt.

### 1.2 Bethe-Näherung

**Zustandssumme** Es gibt einen neuen Hamiltonoperator, als muss die Zustandssumme neu berechnet werden.

$$\begin{aligned} Z_\mathrm{C} &= \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[-\beta \hat{H}_\mathrm{Bethe}\left[\{\sigma_i : i \in \mathbb{N}_0\}\right]\right] \\ &= \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[\beta\left(\mu B\sigma_0 + \mu(B+B')\sum_{j=1}^{q}\sigma_j + J\sum_{j=1}^{q}\sigma_0\sigma_j\right)\right] \end{aligned}$$

Ab hier benutzen wir die Definition von $\alpha_\pm$, die auf dem Aufgabenzettel auch benutzt wird:

$$\alpha_\pm = \beta\left(\frac{\mu(B+B')}{2} \pm \frac{J}{4}\right).$$

Damit erhalten wir dann mit dem Signum (Vorzeichenfunktion) sgn:

$$= \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[\beta\mu B\sigma_0 + 2\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]}\sum_{j=1}^{q}\sigma_j\right]$$

Wir schreiben die Summe über $\sigma_0$ abgetrennt. Außerdem trennen wir die Summe in der Exponentialfunktion in zwei Faktoren auf.

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \exp[\beta\mu B\sigma_0] \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[2\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]} \sum_{j=1}^{q} \sigma_j\right] \\
&= \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \exp[\beta\mu B\sigma_0] \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{q} \exp\left[2\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]}\sigma_j\right]
\end{aligned}
$$

Nun lassen wir die Summe über $\sigma_i$ auf den Faktor mit $j = 1$ wirken. Alle anderen Faktoren können wir jeweils ausklammern. Wir erhalten damit dann $2\cosh$ für jedes Summe-Faktor-Paar. Also erhalten wir zusammen:

$$
= 2^q \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \exp[\beta\mu B\sigma_0] \cosh^q\left[\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]}\right]
$$

Zuletzt führen wir die verbleibende Summe aus.

$$
= 2^q \left( \exp\left[\frac{1}{2}\beta\mu B\right] \cosh^q\left[\alpha_+\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\beta\mu B\right] \cosh^q\left[\alpha_-\right] \right)
$$

**Erwartungswert von $\sigma_j$** Warum steht auf dem Aufgabenzettel folgendes:

$$
\langle\sigma_j\rangle = \left\langle \frac{1}{q} \sum_{j=1}^{q} \sigma_j \right\rangle ?
$$

Auf der linken Seite ist der Index $j$ frei, auf der rechten Seite wird über ihn summiert, daher ist er nicht mehr frei und nach außen sichtbar. Links steht ein Vektor, rechts ein Skalar. Sollen wir links den Index weglassen? Oder soll man die linke Seite ignorieren und den Erwartungswert für $\sigma_j$ ausrechnen, so wie wir unten den Erwartungswert für $\sigma_0$ ausrechnen?

Hier fehlen noch Inhalte.

**Erwartungswert von $\sigma_0$**

$$
\begin{aligned}
\langle\sigma_0\rangle &= \frac{1}{Z_\mathrm{C}} \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_q=\pm\frac{1}{2}} \exp\left[\beta\mu B\sigma_0 + 2\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]} \sum_{j=1}^{q} \sigma_j\right] \sigma_0 \\
&= \frac{1}{Z_\mathrm{C}} \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_q=\pm\frac{1}{2}} \exp[\beta\mu B\sigma_0] \exp\left[2\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]} \sum_{j=1}^{q} \sigma_j\right] \sigma_0
\end{aligned}
$$

Jetzt können wir die ganzen Summanden $\sigma_j$ wieder als Produkte aus der Exponentialfunktion ziehen. Somit erhalten wir jeweils $2\cosh$.

$$
= \frac{1}{Z_\mathrm{C}} \sum_{\sigma_0=\pm\frac{1}{2}} \exp[\beta\mu B\sigma_0] 2^q \cosh^q\left[\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]}\right] \sigma_0
$$

Wir führen die letzte Summe aus.

$$= \frac{2^q}{2Z_\mathrm{C}} \left( \exp\left[\frac{1}{2}\beta\mu B\sigma_0\right] \cosh^q[\alpha_+] - \exp\left[-\frac{1}{2}\beta\mu B\sigma_0\right] \cosh^q[\alpha_-] \right)$$

Mit der Definition von $\tilde{Z}_\mathrm{C}$ erhalten wir genau den Ausdruck auf dem Aufgabenblatt:

$$= \frac{1}{2\tilde{Z}_\mathrm{C}} \left( \exp\left[\frac{1}{2}\beta\mu B\sigma_0\right] \cosh^q[\alpha_+] - \exp\left[-\frac{1}{2}\beta\mu B\sigma_0\right] \cosh^q[\alpha_-] \right).$$

**Gleichheit der Gitterplätze** Es soll $\langle\sigma_0\rangle = \langle\sigma_j\rangle$ gelten. Also setzen wir das gleich. Dabei gehen wir von den Kontrollergebnissen aus. Hier kommt dann der Punkt, an dem man das Papier quer nehmen muss …

$$\exp\left[\frac{\beta\mu B}{2}\right]\cosh^{q-1}[\alpha_+]\sinh[\alpha_+]+\exp\left[-\frac{\beta\mu B}{2}\right]\cosh^{q-1}[\alpha_-]\sinh[\alpha_-]=\exp\left[\frac{\beta\mu B}{2}\right]\cosh^{q}[\alpha_+]-\exp\left[-\frac{\beta\mu B}{2}\right]\cosh^{q}[\alpha_-]$$

Wir setzen $B=0$. Dadurch werden alle Exponentialfunktionen 1 und fallen heraus.

$$\cosh^{q-1}[\alpha_+]\sinh[\alpha_+]+\cosh^{q-1}[\alpha_-]\sinh[\alpha_-]=\cosh^{q}[\alpha_+]-\cosh^{q}[\alpha_-]$$
$$\cosh^{q-1}[\alpha_+]\big(\sinh[\alpha_+]-\cosh[\alpha_+]\big)+\cosh^{q-1}[\alpha_-]\big(\sinh[\alpha_-]+\cosh[\alpha_-]\big)=0$$

Die Klammern können wir mit

$$\sinh[x]-\cosh[x]=\frac{1}{2}\big((\mathrm{e}^x-\mathrm{e}^{-x})-(\mathrm{e}^x+\mathrm{e}^{-x})\big)=-\mathrm{e}^{-x}\qquad\text{und}\qquad\sinh[x]+\cosh[x]=\frac{1}{2}\big((\mathrm{e}^x-\mathrm{e}^{-x})+(\mathrm{e}^x+\mathrm{e}^{-x})\big)=\mathrm{e}^{x}.$$

vereinfachen.

$$-\cosh^{q-1}[\alpha_+]\exp[-\alpha_+]+\cosh^{q-1}[\alpha_-]\exp[\alpha_-]=0$$

Jetzt ist die Gleichung schon wieder so kompakt, dass sie eigentlich gar nicht mehr ins Querformat muss. Daher setzen wir jetzt $\alpha_\pm$ ein. An der Stelle $B=0$ ist $\alpha_\pm$ gegeben durch $\beta\mu B'/2+\beta J/4$.

$$-\cosh^{q-1}\left[\frac{\beta\mu B'}{4}+\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[-\frac{\beta\mu B'}{4}-\frac{\beta J}{4}\right]+\cosh^{q-1}\left[\frac{\beta\mu B'}{4}-\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[\frac{\beta\mu B'}{4}-\frac{\beta J}{4}\right]=0$$
$$\exp\left[-\frac{\beta J}{4}\right]\left(-\cosh^{q-1}\left[\frac{\beta\mu B'}{4}+\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[-\frac{\beta\mu B'}{4}\right]+\cosh^{q-1}\left[\frac{\beta\mu B'}{4}-\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[\frac{\beta\mu B'}{4}\right]\right)=0$$

Damit die Exponentialfunktion null werden kann, muss $\beta\to\infty$ gehen. Dies ist allerdings keine endliche, kritische Temperatur und wird daher nicht weiter beachtet.

$$-\cosh^{q-1}\left[\frac{\beta\mu B'}{4}+\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[-\frac{\beta\mu B'}{4}\right]+\cosh^{q-1}\left[\frac{\beta\mu B'}{4}-\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[\frac{\beta\mu B'}{4}\right]=0$$

Ab hier kommen wir ohne Näherungen wahrscheinlich nicht mehr weiter. Daher entwickeln wir ab hier. In der Aufgabenstellung ist vorgegeben, dass man um $B' = 0$ entwickeln soll. Wir gehen davon aus, dass $B' = 0$ ist, weil wir gerade am Phasenübergang interessiert sind. An diesem tritt die spontane Symmetriebrechung aus und wir erhalten eine makroskopische Magnetisierung durch die Spins. $B'$ kann hier wahrscheinlich als Ordnungsparameter benutzt werden. Am Phasenübergang ist diese Ordnung jedoch noch nicht sonderlich ausgeprägt, sondern erscheint oder verschwindet gerade.

Wir setzen in die letzt Zeile der vorherigen Seite $B' = 0$ ein und erhalten

$$-\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]^{q-1} + \cosh\left[-\frac{\beta J}{4}\right]^{q-1} = 0,$$

was immer erfüllt ist, da cosh eine gerade Funktion ist.

Als nächstes bildet wir die erste Ableitung der Gleichung. Das folgende ist eine Gleichung, die wir einfach in vier Zeilen zerlegen mussten. Dies ändert aber nichts an der Bedeutung.

$$\begin{aligned}&\left(-(q-1)\cosh\left[\frac{\beta\mu B'}{2}+\frac{\beta J}{4}\right]^{q-2}\sinh\left[\frac{\beta\mu B'}{2}+\frac{\beta J}{4}\right]\frac{\beta\mu}{2} - \cosh\left[\frac{\beta\mu B'}{2}+\frac{\beta J}{4}\right]^{q-1}\left(-\frac{\beta\mu}{2}\right)\right)\\ &\exp\left[-\frac{\beta\mu B'}{2}\right]\\ &+\left((q-1)\cosh\left[\frac{\beta\mu B'}{2}-\frac{\beta J}{4}\right]^{q-2}\sinh\left[\frac{\beta\mu B'}{2}-\frac{\beta J}{4}\right]\frac{\beta\mu}{2} + \cosh\left[\frac{\beta\mu B'}{2}-\frac{\beta J}{4}\right]^{q-1}\frac{\beta\mu}{2}\right)\\ &\hfill\exp\left[\frac{\beta\mu B'}{2}\right] = 0\end{aligned}$$

Dort setzen wir auch $B' = 0$ ein und erhalten:

$$\begin{aligned}&-(q-1)\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]^{q-2}\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\frac{\beta\mu}{2} - \cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]^{q-1}\left(-\frac{\beta\mu}{2}\right)\\ &\qquad+(q-1)\cosh\left[-\frac{\beta J}{4}\right]^{q-2}\sinh\left[-\frac{\beta J}{4}\right]\frac{\beta\mu}{2} + \cosh\left[-\frac{\beta J}{4}\right]^{q-1}\frac{\beta\mu}{2} = 0\end{aligned}$$

Nun können wir dies ein wenig vereinfachen, indem wir wieder ausnutzen, dass cosh gerade und sinh ungerade ist. Den Faktor 2 teilen wir heraus:

$$\left(-(q-1)\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]^{q-2}\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right] + \cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]^{q-1}\right)\frac{\beta\mu}{2} = 0$$

**Kritische Temperatur** Nun ist eine Lösung dieser Gleichung, dass $\beta = 0$ ist. Dies ist jedoch unrealistisch. Daher muss die Klammer null sein.

$$\begin{aligned}(q-1)\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]^{q-2}\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right] - \cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]^{q-1} &= 0\\ \cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]^{q-2}\left((q-1)\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right] - \cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\right) &= 0\end{aligned}$$

Da cosh positiv definit ist, kann dieser Faktor nicht null sein. Daher muss es wieder die Klammer sein.

$$
\begin{aligned}
(q-1)\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right] - \cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right] &= 0 \\
\frac{4}{J}\operatorname{arcoth}[q-1] &= \beta \\
\frac{J}{4k_\mathrm{B}}\operatorname{arcoth}[q-1]^{-1} &= T_\mathrm{C}
\end{aligned}
$$

Wie in Abbildung 2 zu sehen, verhält sich für $q \to \infty$ dieser Term genauso, wie die Skalierung mit $\propto q$ in der vorherigen Teilaufgabe. Damit erhalten wir das gleiche Ergebnis.

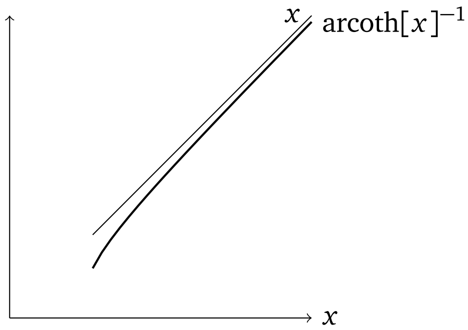


Abbildung 2: Asymptotisches Verhalten der Funktion $\operatorname{arcoth}[x]^{-1}$.

## 2 Ginzburg-Landau Theorie des Heisenberg-Modells

Hier fehlen noch Inhalte.