

PI4.1/PI5.1 SIUG SPIN-KETTE

Hamiltonian: $\mathcal{H} = \frac{g\mu_B}{h} \sum_{i=1}^N S_i^z H - \frac{J}{h^2} \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z$

Bessere Variablen: $S_i^z = \frac{h}{2} \sigma_i$ $h = \frac{g\mu_B}{2} H$

$$\Rightarrow \boxed{\mathcal{H} = h \sum_{i=1}^N \sigma_i - J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1}}$$

a) Spurrelation

$$\text{Sp}_{(1)} e^{\frac{4\beta J}{h^2} S_1^z S_2^z} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2} = 2 \cosh(\beta J)$$

$$\begin{aligned} \text{Sp}_{(1)} S_1^z e^{\frac{4\beta J}{h^2} S_1^z S_2^z} &= \frac{h}{2} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sigma_1 e^{\beta J \sigma_1 \sigma_2} = \frac{h}{2} (e^{\beta J \sigma_2} - e^{-\beta J \sigma_2}) \\ &= \begin{cases} +\frac{h}{2} 2 \sinh(\beta J) & \text{für } \sigma_2 = +1 \\ -\frac{h}{2} 2 \sinh(\beta J) & \text{für } \sigma_2 = -1 \end{cases} \\ &= 2 S_2^z \sinh(\beta J) \quad \square \end{aligned}$$

b) Korrelationsfunktion für $H=0$:

$$\langle S_k^z \rangle = Z^{-1} \text{Sp} \left(S_k^z e^{\frac{4\beta J}{h^2} \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z} \right)$$

In H3d haben wir die Zustandssumme für das Modell bei

$$H=0 \text{ berechnet (} J_1 \rightarrow J \text{). } Z_N = 2 [2 \cosh(\beta J)]^{N-1}$$

Dann folgt: $k < N$

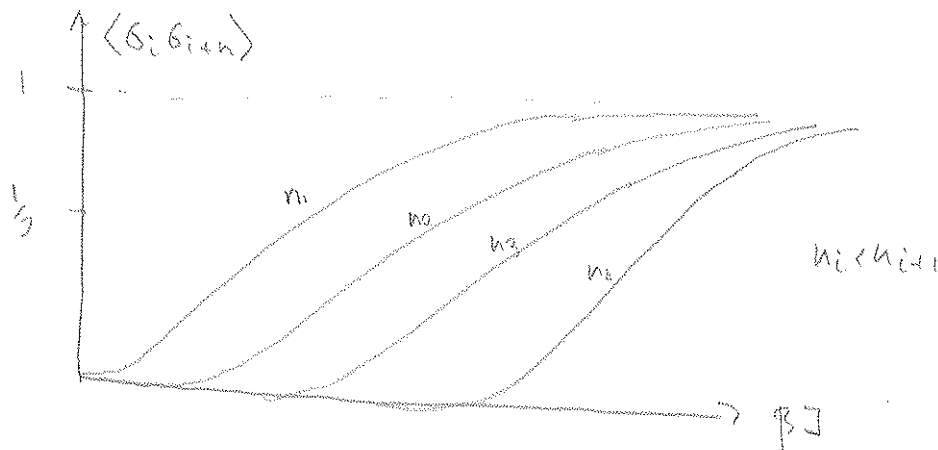
$$\begin{aligned}
 \langle S_k^z \rangle &= Z_N^{-1} \text{Sp}_{(1)} \cdot \text{Sp}_{(2)} S_2^z \text{Sp}_{(2)} \cdot \text{Sp}_{(3)} \cdot \underbrace{\text{Sp}_{(k)}(e^{\beta J \sum_{i=2}^{k-1} S_i S_{i+1}})}_{2 \cosh(\beta J)} e^{\beta J \sum_{i=2}^{k-1} S_i S_{i+1}} \\
 &= Z_N^{-1} (2 \cosh(\beta J))^{k-1} \text{Sp}_{(1)} \cdot \underbrace{\text{Sp}_{(k)}(S_k^z e^{\beta J \sum_{i=2}^{k-1} S_i S_{i+1}})}_{S_{k+1}^z (2 \sinh(\beta J))} e^{\beta J \sum_{i=2}^{k-1} S_i S_{i+1}} \\
 &= Z_N^{-1} [2 \cosh(\beta J)]^{k-1} [2 \sinh(\beta J)]^{N-k} \underbrace{\text{Sp}_{(N)} S_N^z}_{=0} = 0 //
 \end{aligned}$$

Analog folgt: $k+n < N$

$$\begin{aligned}
 \langle S_k^z S_{k+n}^z \rangle &= Z_N^{-1} [2 \cosh \beta J]^{k-1} [2 \sinh \beta J]^n \\
 &\quad \times \text{Sp}_{(1)} \text{Sp}_{(2)} \cdots \text{Sp}_{(k+n)} \underbrace{(S_{k+n}^z)^2}_{\frac{\hbar^2}{4}} e^{\frac{4\beta J}{\hbar^2} \sum_{i=k+n}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z} \\
 &= \frac{\hbar^2}{4} Z_N^{-1} [2 \cosh \beta J]^{k-1} [2 \sinh \beta J]^n [2 \cosh \beta J]^{N-(k+n)} \underbrace{\text{Sp}_{(N)}(1)}_{=2} \\
 &= \frac{\hbar^2}{4} \frac{(\sinh \beta J)^n}{(\cosh \beta J)^n} = \frac{\hbar^2}{4} \tanh^n(\beta J)
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle S_k^z S_{k+n}^z \rangle_{k=0} - \langle S_k^z \rangle_{k=0} \langle S_{k+n}^z \rangle_{k=0} = \frac{\hbar^2}{4} \tanh^n(\beta J)}$$

Diskussion:



Umkehrpunkt

$$\frac{1}{2} = \tanh^n(\beta J)$$

$$\Rightarrow \beta J = \operatorname{arctanh}\left(\frac{1}{2^{1/n}}\right) = \frac{1}{2} \log \frac{1 + \frac{1}{2^{1/n}}}{1 - \frac{1}{2^{1/n}}}$$

$$= \frac{1}{2} \log \frac{2^{1/n} + 1}{2^{1/n} - 1}$$

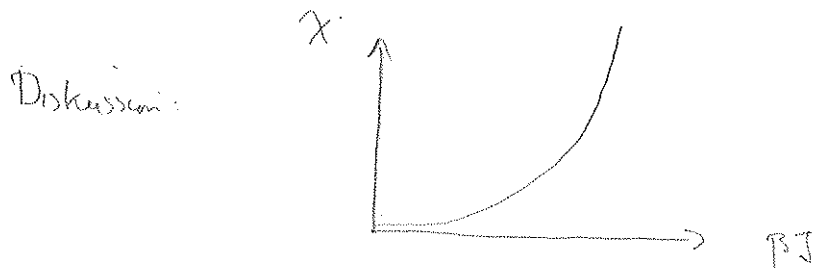
c) Suszeptibilität:

$$\begin{aligned} \chi(H, T) &= \frac{\partial M^z}{\partial H} = \frac{\partial}{\partial H} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i^z \rangle \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial H} \left(\operatorname{Sp}(S_i^z e^{-\beta \mathcal{H}}) Z_N^{-1}(H) \right) \\ &= -\beta \frac{q_{ij}^B}{N} \left[\sum_{ij} \langle S_i^z S_j^z \rangle - \sum_{ij} \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle \right] \\ &= -\beta \left(\frac{q_{ij}^B}{N} \right) \sum_{ij} q_{ij} \end{aligned}$$

Korrelationsfunktion

$$q_{ij} := \langle S_i^z S_j^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle$$

$$\begin{aligned}
 d) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \chi(0, T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(-\beta \frac{g \mu_B}{N k} \right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{k^2}{4} \tanh^{i-1}(\beta J) \\
 &= -\beta \frac{g \mu_B}{4} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^{N-1} \tanh^n(\beta J) \\
 &= -\frac{\beta g \mu_B}{4} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1 - \tanh^N(\beta J)}{1 - \tanh(\beta J)} \right) \quad \tanh^n(x) < 0 \\
 &= \left(-\frac{\beta g \mu_B}{4} \right) \frac{1}{1 - \tanh(\beta J)}
 \end{aligned}$$



divergiert für $\beta J \rightarrow \infty$

$\Rightarrow$ Divergenz der
Suszeptibilität
bei $T=0$

$\Rightarrow$ 1D-ISINGMODELL hat Phasenübergang
bei $T=0$.

HIS 2 - MEIN-FELD FÜR HEISENBERG-MODELL IN DER PFERKE

ENTWICKLUNG

In geeigneten Variablen:

$$\mathcal{H}_\alpha = - \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + \sum_i \vec{h}_i^{(0)} \cdot \vec{\sigma}_i$$

a) Gibbs'sche Freie Energie:

$$G_\alpha(\vec{m}_i, \beta; \alpha) = -\beta^{-1} \ln Z_\alpha - \sum_i \vec{h}_i^{(0)} \cdot \underbrace{\langle \vec{\sigma}_i \rangle_\alpha}_{\vec{m}_i}$$

□ Nullte Ordnung

$$\boxed{G_0 = -\beta^{-1} S_0} \quad \text{mit der Entropie } S_0 \text{ des freien Systems.}$$

$$S_0 = \ln Z_0 + \beta \sum_i \vec{h}_i^{(0)} \cdot \vec{m}_i$$

Zustandssumme freies System.

$$Z_0 = \text{Sp}_{(1,1)} \left(e^{-\beta \sum_i \vec{h}_i^{(0)} \cdot \vec{\sigma}_i} \right) = \prod_{i=1}^N \text{Sp} \left(e^{-\beta \vec{h}_i^{(0)} \cdot \vec{\sigma}_i} \right)$$

Nun ist

$$\text{Sp} \left(e^{-\beta \vec{h}_i^{(0)} \cdot \vec{\sigma}_i} \right) = e^{-\beta |\vec{h}_i^{(0)}|} + e^{+\beta |\vec{h}_i^{(0)}|} = 2 \cosh(\beta |\vec{h}_i^{(0)}|)$$

da man ja o.B.d.A. die Spinquantisierungsachse von $\vec{\sigma}$ // zu $\vec{h}_i^{(0)}$ wählen kann!

$$\Rightarrow Z_0 = 2^N \prod_{i=1}^N \cosh(\beta |\vec{h}_i^{(0)}|) \quad \text{define } h_i^{(0)} := |\vec{h}_i^{(0)}|$$

Entropie

$$\Rightarrow S_0(\vec{m}; \beta) = N \ln 2 + \sum_{i=1}^N \left(\ln \cosh(\beta h_i^{(0)}) + \beta \vec{h}_i^{(0)} \cdot \vec{m}_i \right)$$

Elimination von $h_i^{(0)}$: ($a = x, y, z$)

$$\frac{\partial S_0}{\partial h_i^{(0)}} \stackrel{!}{=} 0 = \beta \tanh(\beta h_i^{(0)}) \underbrace{\frac{\partial}{\partial h_i^{(0)}} \sqrt{h_i^{(0)2}}}_{\frac{\vec{h}_i^{(0)}}{h_i^{(0)}} =: \vec{e}_{h_i^{(0)}}} + \beta \vec{m}_i$$

$$\Rightarrow -\vec{m}_i = \vec{e}_{h_i^{(0)}} \cdot \tanh(\beta h_i^{(0)}) \quad \Rightarrow \quad \vec{h}_i^{(0)} \parallel \vec{m}_i$$

$$\Rightarrow |\vec{h}_i^{(0)}| = \beta^{-1} \operatorname{arctanh}(-|\vec{m}_i|) = \beta^{-1} \frac{1}{2} \log \frac{1-|\vec{m}_i|}{1+|\vec{m}_i|}$$

Daraus folgt

$$\boxed{\frac{\vec{h}_i^{(0)}}{h_i^{(0)}} = \frac{\vec{m}_i}{|\vec{m}_i|} \beta^{-1} \operatorname{arctanh}(-|\vec{m}_i|)}$$

Und somit

$$S_0 = N \ln 2 + \sum_{i=1}^N \left[\overbrace{|\vec{m}_i| \frac{1}{2} \log \frac{1-|\vec{m}_i|}{1+|\vec{m}_i|}}^{\vec{h}_i^{(0)} \cdot \vec{m}_i} + \ln \left(\frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{1-|\vec{m}_i|}{1+|\vec{m}_i|}} + \sqrt{\frac{1+|\vec{m}_i|}{1-|\vec{m}_i|}} \right) \right) \right]$$

$$\ln \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{1-|\vec{m}_i|^2}} \right) = -\ln 2 - \frac{1}{2} \ln(1-|\vec{m}_i|^2)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \log(1 - |\vec{m}_i|) (|\vec{m}_i| - 1) + \log(1 + |\vec{m}_i|) (-1 - |\vec{m}_i|)$$

Then:

$$G^{(0)} = -\beta^{-1} S_0 = \frac{\beta^{-1}}{2} \sum_{i=1}^N (1 + |\vec{m}_i|) \log(1 + |\vec{m}_i|) + (1 - |\vec{m}_i|) \log(1 - |\vec{m}_i|)$$

Similarly for $G^{(1)}$ we have

$$G^{(1)} = \langle K \rangle_0 = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \underbrace{\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle_0}_{= \langle \vec{\sigma}_i \rangle_0 \cdot \langle \vec{\sigma}_j \rangle_0 = \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}$$

D.h. in linear Ordnung sieht man:

$$G_\alpha \approx \frac{\beta^{-1}}{2} \sum_{i=1}^N (1 + |\vec{m}_i|) \log(1 + |\vec{m}_i|) + (1 - |\vec{m}_i|) \log(1 - |\vec{m}_i|) - \frac{\alpha}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{m}_i \cdot \vec{m}_j$$

b) Relation $\vec{h}_i - \vec{m}_i$:

$$\vec{h}_i^{\text{ext}} = \left. \frac{\partial G_{\alpha-1}}{\partial \vec{m}_i} \right|_{\alpha=0} \approx \frac{\beta^{-1}}{2} \frac{\vec{m}_i}{|\vec{m}_i|} \log \frac{1 + |\vec{m}_i|}{1 - |\vec{m}_i|} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N J_{ij} \vec{m}_j$$

D.h. $\vec{h}_i^{\text{ext}} \parallel \vec{m}_i$ wegen Austauschwechselwirkung.

c) Homogene Ferromagnet: $\vec{m}_i = \vec{m} \quad \forall i$

$$\sum_{j=1}^N J_{ij} \vec{m}_j = \vec{m} \sum_{\substack{j \in \text{Nächste Nachbar} \\ \text{zu } i}} J_{ij}$$



$$= 6 \vec{m} J$$

Dann:

$$\vec{h}_i^{\text{ext}} = \frac{\beta T}{2} \frac{\vec{m}}{|\vec{m}|} \log \frac{1+m}{1-m} - \vec{m} \cdot 6J$$

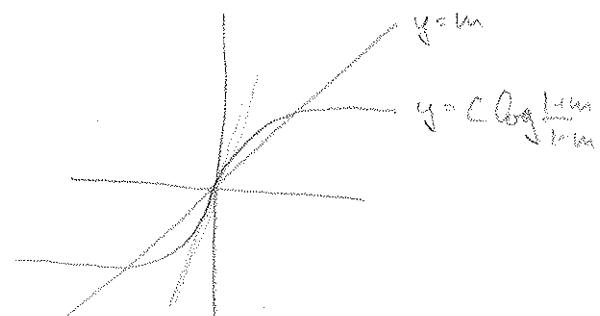
D.h. $\vec{h}_i^{\text{ext}} \parallel \vec{m}$ und $\vec{h}_i^{\text{ext}} = h \cdot \vec{e}_h^{\text{ext}}$

$$h = \frac{\beta T}{2} \log \frac{1+m}{1-m} - 6J \cdot m$$

Kritische Temperatur: $\boxed{T_c = 6J/\beta}$

Da spontane Magnetisierung vorliegt, wenn für $h=0$ auch $m \neq 0$ eine Lösung ist:

$$m = \frac{\beta T}{6J} \log \frac{1+m}{1-m}$$



Steigung rechte Seite bei $m=0$:

$$\frac{\beta T}{6J} \left(\frac{1}{1+m} + \frac{1}{1-m} \right) \Big|_{m=0} = \frac{\beta T}{6J} \geq 1$$

$$\Rightarrow \boxed{\beta T_c = 6J}$$