H B.1 Ising Modell

(a) Molekularfeld - Näherung

$$\hat{H}_{MF} = - \sum_i (Jq \langle\sigma\rangle + \mu B)\, \sigma_i$$

Berechne die kanonische Zustandssomme:

$Z_c = tr[W]$ ← ist W nicht schon normiert?

$$= \sum_i \exp[-\beta H_i]$$

$$= \underbrace{\sum_i \exp[-\beta\, (Jq \langle\sigma\rangle + \mu B)\, \sigma_i]}_{W[i]}$$

$$\langle\sigma\rangle = tr[\sigma W]$$

$$= \frac{1}{Z_c} \sum_i \exp[-\beta (Jq \langle\sigma\rangle + \mu B) \sigma_i]\ \sigma_i$$

tanh ist:

$$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

Dort taucht kein ½ auf. Also muss das durch die Spins kommen.

σ_i kann die Werte +½ und -½ annehmen.

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{Z_c} (\exp_\uparrow \cdot n_\uparrow - \exp_\downarrow \cdot n_\downarrow)$$ wobei $n_\uparrow$ die Anzahl der is ist, wo $\sigma_i = +\frac{1}{2}$ ist.

Z_c lässt sich so schreiben als:

$$Z_c = \sum_i \exp[\ldots] = \exp_\uparrow n_\uparrow + \exp_\downarrow n_\downarrow$$

Zusammen ist dann also:

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{2} \frac{\exp_\uparrow n_\uparrow - \exp_\downarrow n_\downarrow}{\exp_\uparrow n_\uparrow + \exp_\downarrow n_\downarrow}$$

und $\exp_\uparrow$ ist $\exp[\frac{1}{2}(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B)]$.

sowie $\exp_\downarrow$ ist $\exp[-\frac{1}{2}(\ldots)]$.

Jetzt stören allerdings die $n_\uparrow$ und $n_\downarrow$. Wenn diese gleich wären, könnte man ausklammern und wäre fertig. Wenn sie aber gleich sind, ist $\langle\sigma\rangle = 0$. Das ist aber nicht sonderlich interessant und keine Lösung für $B \neq 0$.

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{2N}(n_\uparrow - n_\downarrow) \qquad N = n_\uparrow + n_\downarrow$$

$$= \frac{1}{2} \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{n_\uparrow + n_\downarrow}$$

Dies sieht auch nach tanh aus.

d.h. Man summiert ja gar nicht über die Teilchen, sondern die Zustände. Die Spur geht über Zustände!

$$Z_{c,1} = \exp_\uparrow + \exp_\downarrow = \exp\left[\sum_{\pm 1/2} \ldots \sum_{\pm 1/2}\right] = \prod \ldots \prod \exp[\ldots]$$

$$Z_c = (\exp_\uparrow + \exp_\downarrow)^N$$

$$\langle\sigma\rangle = \frac{1}{Z_c} \sum_{\pm 1/2} \ldots \sum_{\pm 1/2} \exp[\ldots]$$

$$= \frac{1}{{Z_{c,1}}^N} \left(\sum_{\pm 1/2} \exp[\ldots]\right)^N = \frac{1}{2} \frac{\exp_\uparrow - \exp_\downarrow}{\exp_\uparrow + \exp_\downarrow}$$

$$= \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{1}{2}\beta\left(Jq\langle\sigma\rangle + \mu B\right)\right]$$

Lino, hast du dich amüsiert? ☺

Graphische Diskussion

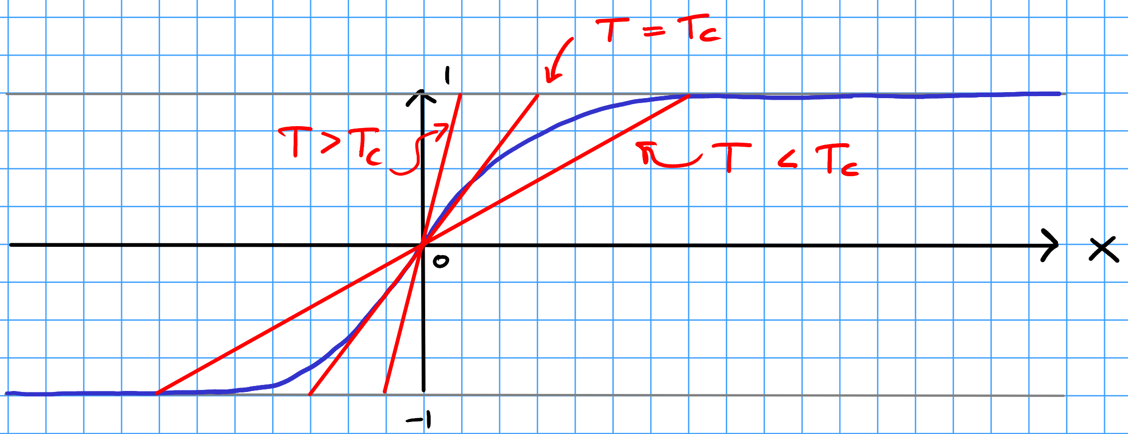
Für $B = 0$ gilt

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

Umstellen: $$x := \frac{1}{2}\beta Jq\langle\sigma\rangle$$

$$\langle\sigma\rangle = \frac{2\,k_B T}{Jq}\,x$$

$$\frac{4\,k_B T}{Jq}\,x = \tanh(x)$$



Wenn $\frac{4\,k_B T}{Jq} = 1$ ist, ist dies die kritische Temperatur.

$$T_c = \frac{Jq}{4\,k_B}$$

(b) Bethe - Näherung

Es gibt einen neuen Hamiltonoperator, also muss eine neue Zustandssumme her.

$$Z_c = \sum_{\sigma_1 = \pm \frac{1}{2}} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm \frac{1}{2}} \exp\left[-\beta \hat{H}_{Bethe}[\{\sigma_i\}]\right]$$

$$= \sum_{\sigma_1 = \pm \frac{1}{2}} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm \frac{1}{2}} \exp\left[-\beta\left(-\mu B \sigma_0 - \mu(B+B')\sum_{j=1}^{q}\sigma_j - J\sum_{j=1}^{q}\sigma_0\sigma_j\right)\right]$$

Der Hamiltonoperator hängt von mehreren σ_j ab. Für die Zustandssumme muss ich über alle möglichen Zustände summieren.

Bei $\sum_{j=1}^{q}\sigma_j$ gibt es alle Möglichkeiten von $-\frac{q}{2}, \dots, \frac{q}{2}$

Im letzten Summand kann man σ_0 vorziehen und erhält $\sum_{j=0}^{q}\sigma_j$, wobei es mit $\pm\frac{1}{2}$ multipliziert wird.

Daher kann ich an dieser Stelle die $\alpha_\pm$ einführen, die später auch gebraucht werden.

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

$$= \sum_{\sigma_1 = \pm \frac{1}{2}} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm \frac{1}{2}} \exp\left[\beta\mu B\sigma_0 + 2\alpha_{sgn(\sigma_0)}\sum_{j=1}^{q}\sigma_j\right]$$

Das ist jetzt deutlich kompakter und führt wahrscheinlich einfacher weiter. Ich muss wahrscheinlich auch noch über $\sigma_0 = \pm\frac{1}{2}$ rechnen. Vielleicht mache ich das erst gleich, und summiere erstmal über alle anderen $j = 1, \dots, q$.

$$= \sum_{\sigma_0, \sigma_j} \exp\left[\beta \mu B \sigma_0\right] \exp\left[2 \alpha_{\mathrm{sgn}(\sigma_0)} \sum_{j=1}^{q} \sigma_j\right]$$

Für jedes σ_j gibt es dann zwei Summanden. Ich fange bei $j=1$ an und ziehe das somit aus der inneren Summe.

$$\exp\left[2 \alpha_{\mathrm{sgn}(\sigma_0)} \left(\frac{1}{2} + \sum_{j=2}^{q} \sigma_j\right)\right] + \exp\left[2 \alpha_{\mathrm{sgn}(\sigma_0)} \left(-\frac{1}{2} + \sum_{j=2}^{q} \sigma_j\right)\right]$$

Die Summen in den Exponenten kann man in Produkte überführen. Den Rest ausklammern.

$$\exp\left[2 \alpha_{\mathrm{sgn}(\sigma_0)} \sum_{j=2}^{q} \sigma_j\right] \left(\exp\left[\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]}\right] + \exp\left[-\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]}\right]\right)$$

Die letzte Klammer kann man als $2 \cosh\left[\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]}\right]$ schreiben

Das ganze mache ich also q mal. Damit ist die Summe über die restlichen σ_j außen und die Summe über die restlichen j innen weg. Es bleibt:

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

Also noch die letzte Summe ausführen.

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

Hoffentlich stimmt das jetzt so. Nun den Erwartungswert des Spins, $\langle \sigma_j \rangle$, ausrechnen.

Warum steht auf dem Aufgabenzettel folgendes?

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

Erwartungswert für Spin j.

Erwartungswert für den Mittelwert der Nachbarn von Spin 0.

Wenn man links den Index j weglässt, ist es etwas sinnvoller.

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{Z_c} \sum_{\sigma_0 = \pm\frac{1}{2}} \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_j} \exp(-\beta H) \quad \frac{1}{q} \sum_{j=1}^{q} \sigma_j$$

$\tilde{Z}_c$ ist $Z_c / 2^q$. Wahrscheinlich werde ich gleich 2^q im Zähler erzeugen. Mal schauen.

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

Jetzt kann man wieder Summe in Produkt umwandeln

$$= \frac{1}{q Z_c} \sum_{\sigma_0} \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_q} \exp[\beta \mu B \sigma_0] \prod_{k=1}^{q} \exp\left[\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]} \mathrm{sgn}[\sigma_k]\right] \sum_{j=1}^{q} \sigma_j$$

Bringt es etwas, die Operatoren zu tauschen?

$$= \frac{1}{q Z_c} \sum_{\sigma_0} \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_q} \exp[\beta \mu B \sigma_0] \sum_{j=1}^{q} \prod_{k=1}^{q} \exp\left[\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]} \mathrm{sgn}[\sigma_k]\right] \sigma_j$$

Vorher war es einfacher, oder?

$$= \frac{1}{q Z_c} \sum_{\sigma_0} \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_q} \exp[\beta \mu B \sigma_0] \exp\left[2\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]} \sum_{k=1}^{q} \sigma_k\right] \sum_{j=1}^{q} \sigma_j$$

Jetzt gibt es diese Summe der Spins doppelt.
Die geht von $-\frac{q}{2}$ bis $\frac{q}{2}$, wobei die Anzahl der möglichen Realisierungen für eine gewisse Spinsumme in der Mitte größer ist.

Die Anzahl dieser Möglichkeiten sehe ich aber im Ergebnis nicht. Vielleicht berechne ich erst mal $\langle\sigma_0\rangle$, um die Art der Rechnung zu sehen.

$$\langle\sigma_0\rangle = \frac{1}{Z_c} \sum_{\sigma_0,\sigma_1,\dots,\sigma_q} \exp\left[-\beta H(\{\sigma_k : k=0,\dots,q\})\right] \sigma_0$$

$$= \frac{1}{Z_c} \sum_{\sigma_0,\sigma_1,\dots,\sigma_q} \exp\left[\beta\mu B\sigma_0 + 2\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]} \sum_{j=1}^{q} \sigma_j\right] \sigma_0$$

$$= \frac{1}{Z_c} \sum_{\sigma_0,\sigma_1,\dots,\sigma_q} \exp\left[\beta\mu B\sigma_0\right] \exp\left[2\alpha_{\mathrm{sgn}[\sigma_0]} \sum_{j=1}^{q} \sigma_j\right] \sigma_0$$

Jetzt kann ich die ganzen Summanden σ_j wieder als Produkte aus der Exponentialfunktion ziehen. Somit erhalte ich wieder jeweils 2cosh.

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

Nun noch die Summe über σ_0.

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

Wenn ich jetzt noch das $\tilde{Z}_c$ einsetze, passt es.

Wie bekomme ich jetzt das sinh anstelle des einen cosh bei $\langle \sigma_j \rangle$ hin?

Gleichheit der Gitterplätze

Es soll $\langle \sigma_0 \rangle = \langle \sigma_j \rangle$ gelten. Also setze ich das gleich.

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

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

Setze $B = 0$

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

Dies kann man noch zusammenfassen.

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

$$\sinh[x] - \cosh[x] = \frac{1}{2}\left(\left(e^{x} - e^{-x}\right) - \left(e^{x} + e^{-x}\right)\right) = -e^{-x}$$

Ich fordere jetzt, dass die runden Klammern jeweils 0 sind.

$$e^{-\alpha_+} \stackrel{!}{=} 0 \quad \wedge \quad e^{-\alpha_-} \stackrel{!}{=} 0$$

Das ist aber so nicht zu erfüllen, außer im Grenzwert $\alpha_\pm \to \infty$.

$$\alpha_\pm\Big|_{B=0} = \frac{\beta \mu B'}{2} + \frac{\beta J}{4}$$

Sollte dies gegen ∞ gehen, geht $T \to 0$. Wohl nicht sinnvoll.

cosh [x] wird aber minimal 1. Das hilft auch nicht.

Oh, man soll das gar nicht direkt analytisch lösen. Also nochmal die Gleichung so:

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

Wenn $B' \to 0$ betrachtet werden soll, und zur ersten Ordnung in B' entwickelt werden soll, werde ich die beiden Summanden um $B'=0$ entwickeln.

Man betrachtet $B' \to 0$, da am Phasenübergang das System nicht geordnet ist und daher $B' \to 0$ gilt.

Nullte Ordnung, $B'=0$ einsetzen. Es bleibt der $\pm \frac{\beta J}{4}$ Term bestehen:

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

Wenn ich jetzt nach B' ableite, wird es wahrscheinlich hässlich. Mal schauen.

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

$$(q-1)\cosh^{q-2}[\alpha_+]\sinh[\alpha_+]\,\alpha_+'\exp[-\alpha_+]$$
$$-\cosh^{q-1}[\alpha_+]\exp[-\alpha_+]\,\alpha_+'$$
$$+(q-1)\cosh^{q-2}[\alpha_-]\sinh[\alpha_-]\,\alpha_-'\exp[-\alpha_-]$$
$$-\cosh^{q-1}[\alpha_-]\exp[\alpha_-]\,\alpha_-' = 0$$

Das jetzt bei $B'=0$ auswerten und hinter jeden Faktor ein B' setzen.

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

$\Rightarrow$

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

cosh ist eine gerade Funktion. Also kann man da viel kürzen.

$$\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[-\frac{\beta J}{4}\right] + \cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[\frac{\beta J}{4}\right]$$

$$+ (q-1)\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\frac{\beta\mu}{2}\exp\left[-\frac{\beta J}{4}\right]B'$$

$$-\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[-\frac{\beta J}{4}\right]\frac{\beta\mu}{2}B'$$

$$-(q-1)\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\frac{\beta\mu}{2}\exp\left[\frac{\beta J}{4}\right]B'$$

$$-\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\exp\left[\frac{\beta J}{4}\right]\frac{\beta\mu}{2}B' = 0$$

$$-(q-1)\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\beta\mu\sinh\left[\frac{\beta J}{4}\right]B'$$

$$-\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\cosh\left[\frac{\beta J}{4}\right]\beta\mu B'$$

$$\cosh^2\left[\frac{\beta J}{4}\right]$$

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

Benutze $\cosh^2 - \sinh^2 = 1$. $\qquad \sinh^2 - \cosh^2 = -1$

$$\cosh^2\left[\frac{\beta J}{4}\right] - q\sinh^2\left[\frac{\beta J}{4}\right]\beta\mu B' = 1$$

Angenommen, ich darf jetzt noch mal $B'=0$ machen. Dann muss $\frac{\beta J}{4} = 0$ sein. Also $T \to \infty$. Das kann es schlecht sein.