Aufgabe 1 *Störungstheorie klassischer wechselwirkender Systeme* **5 P.**

Betrachten Sie ein klassisches nichtwechelwirkendes System von N ununterscheidbaren Teilchen mit Hamiltonfunktion

$$H = H_0 + \lambda H_{\text{int}}, \tag{1}$$

mit kleinem dimensionslosen Entwicklungsparameter $\lambda \ll 1$. Die kanonische Zustandssumme ist gegeben durch

$$Z_N = \int \frac{d^{3N}p\, d^{3N}q}{N! h^{3N}} e^{-\beta H}, \tag{2}$$

die im Allgemeinen nicht in geschlossener Form berechenbar ist. Ein Lösungsansatz ist die Störungstheorie, d.h. Entwicklung in λ.

a) Zeigen Sie, dass die störungstheoretische Reihenentwicklung der kanonischen Zustandssumme gegeben ist durch *3 P.*

$$Z_N = Z_N^{(0)} \left(1 + \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} \langle (-\beta H_{\text{int}})^n \rangle_0 \right), \tag{3}$$

mit $Z_N^{(0)}$ der Zustandssumme für den wechselwirkungsfreien Fall. Diese ist gegeben durch

$$Z_N^{(0)} = \int \frac{d^{3N}p\, d^{3N}q}{N! h^{3N}} e^{-\beta H_0}, \tag{4}$$

wobei $\langle O \rangle_0$ den Erwartungswert der Observablen O im wechselwirkungsfreien Fall bezeichnet

$$\langle O \rangle_0 = \frac{1}{Z_N^{(0)}} \int \frac{d^{3N}p\, d^{3N}q}{N! h^{3N}} O e^{-\beta H_0}. \tag{5}$$

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta(H_0 + \lambda H_{int})}$$
$$= e^{-\beta H_0} e^{-\beta \lambda H_{int}}$$
$$= e^{-\beta H_0} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta \lambda H_{int})^k}{k!} \right)$$

$$Z_N = \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta H_0} d^{3N}p\, d^{3N}q$$
$$= \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta H_0} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta H_{int})^k \lambda^k}{k!} d^{3N}p\, d^{3N}q$$
$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta H_0} \frac{(-\beta H_{int})^k \lambda^k}{k!} d^{3N}p\, d^{3N}q$$
$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta H_0} (-\beta H_{int})^k d^{3N}p\, d^{3N}q$$
$$= Z_N^{(0)} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta H_0} (-\beta H_{int})^k d^{3N}p\, d^{3N}q$$
$$= Z_N^{(0)} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} \langle (-\beta H_{int})^k \rangle_0$$

b) Berechnen Sie die Störungsreihe der freien Energie F bis zur zweiten Ordnung in λ. Erklären Sie, warum der Beitrag der zweiten Ordnung die Varianz des wechselwirkenden Beitrags H_{int} zur Hamilton-Funktion, d.h. $\langle H_{\text{int}}^2 \rangle_0 - \langle H_{\text{int}} \rangle_0^2$ enthält. *2 P.*

$$F = -k_B T \ln Z_k$$
$$\approx -k_B T \ln \left(Z_N^{(0)} - \lambda \beta \langle H_{int} \rangle_0 + \frac{\lambda^2 \beta^2}{2} \langle H_{int}^2 \rangle_0 \right)$$

d.h. $\langle H_{\text{int}}^2 \rangle_0 - \langle H_{\text{int}} \rangle_0^2$ enthält.

oops

Betrachten Sie folgenden Ising-Hamilton-Operator

$$H_{\text{Ising}} = -B\sum_{i=0}^{N} s_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{i,j} s_i s_j \qquad (6)$$

mit dem Magnetfeld B und einer Spinwechselwirkung J_{ij}, wobei die Spins die Werte $s = \pm 1$ annehmen können und $\sum_{ij} = \sum_i^N \sum_j^N$. Sei $m \equiv \langle s_i \rangle$ ein (noch unbekannter) homogener Spinmittelwert und $a_{i,j} \equiv (s_i - m)(s_j - m)$ die quadratische Abweichung von diesem.

a) Ersetzen Sie das Spinprodukt $s_i s_j$ im Hamilton-Operator H_{Ising} in dem Sie $a_{i,j} \approx 0$ nähern (Molekularfeldnäherung). Nimmt man des Weiteren ein homogenes mit Translationsinvarianz an, so hängt die Wechselwirkung J_{ij} nur vom Indexabstand $i - j$ ab und damit wird $\sum_i J_{ij} = \sum_i J_{i-j} = \Theta$ wobei Θ eine j-unabhängige Konstante ist. Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator damit die folgende Form annimmt: *3 P.*

$$H_m = -\tilde{B}\sum_i s_i + C \qquad (7)$$

und bestimmen Sie B und C.

mean field: $a_{i,j} = (s_i - m)(s_j - m)$

$= s_i s_j - s_i m - s_j m + m^2 \overset{!}{\approx} 0$

$s_i s_j \overset{!}{\approx} s_i m + s_j m - m^2$

$$H_{\text{Ising}} = -B\sum_{i=0}^{N} s_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{i,j} s_i s_j$$

$$\overset{!}{\approx} -B\sum_{i=0}^{N} s_i - \frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{i,j}(s_i m + s_j m - m^2)$$

$$= -B\sum_{i=0}^{N} s_i - \frac{m}{2}\sum_{i=0}^{N}\underbrace{\sum_{j=0}^{N} J_{i,j}}_{\Theta} s_i - \frac{m}{2}\sum_{j=0}^{N}\underbrace{\sum_{i=0}^{N} J_{i,j}}_{\Theta} s_j + \frac{m^2}{2}\sum_{j=0}^{N}\underbrace{\sum_{i=0}^{N} J_{i,j}}_{\Theta}$$

$$= -B\sum_{i=0}^{N} s_i - \Theta m\sum_{i=0}^{N} s_i + \frac{m^2 N}{2}\Theta$$

$$= -(B + \Theta m)\sum_{i=0}^{N} s_i + \frac{m^2 N}{2}\Theta$$

$$\tilde{B} = B + \Theta m \qquad C = \frac{m^2 N}{2}\Theta$$

b) Der Hamiltonian in (7) beschreibt eine freie (d.h. nicht-wechselwirkende) Theorie, die sich lösen lässt. Zeigen Sie, dass sich die Zustandssumme des durch H_m beschriebenen Systems schreiben lässt als $Z = e^{-\beta C}\left(2\cosh \beta\tilde{B}\right)^N$. *3 P.*

$$H_m = -\tilde{B}\sum_{i=1}^{N} s_i + C$$

$$Z = \mathrm{tr}\left(e^{-\beta H_m}\right)$$

$$= \mathrm{tr}\left(e^{-\beta C}\prod_{i=1}^{N} e^{-\beta\tilde{B}s_i}\right)$$

$$= \sum_{s_1=-1}^{1}\sum_{s_2=-1}^{1}\cdots\sum_{s_N=-1}^{1} e^{-\beta C}\prod_{i=1}^{N} e^{-\beta\tilde{B}s_i}$$

$$= e^{-\beta C} \prod_{i=1}^{N} \left(e^{-\beta \tilde{B}} + e^{\beta \tilde{B}}\right)$$

$$= e^{-\beta C} \prod_{i=1}^{N} \left(2\cosh(\beta \tilde{B})\right)$$

$$= e^{-\beta C} \left(2\cosh(\beta \tilde{B})\right)^N$$

c) Zeigen Sie unter Nutzung der Definition der Magnetisierung $m = \frac{1}{N}\langle \sum_i s_i \rangle$, dass gilt *4 P.*

$$m = \tanh\{(B + \Theta m)\beta\}, \qquad (8)$$

was eine Bestimmung von m auf eine selbstkonsistente Weise ermöglicht. Wie sieht die Gleichung und ihre Lösung(en) für niedrige Temperaturen $\beta \to \infty$ aus?

$$H = -(B+\Theta m)\sum_{i=1}^{N} s_i + \frac{m^2 N}{2}\Theta$$

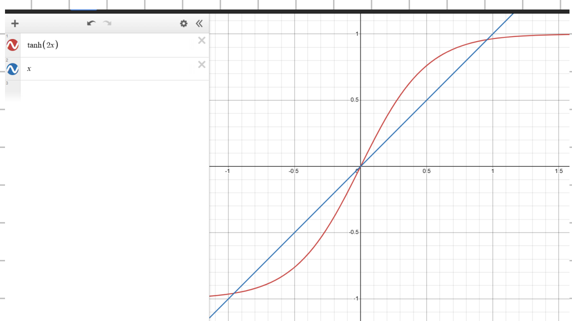
$$\left\langle \sum s_i \right\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial B}$$

$$= \frac{1}{Z} e^{-\beta C} N \left(2\cosh\beta\tilde{B}\right)^{N-1}\left(2\sinh\beta\tilde{B}\right)\frac{\partial \tilde{B}}{\partial B}\frac{\beta}{\beta}$$

$$m = \frac{1}{Z} e^{-\beta C}\left(2\cosh\beta\tilde{B}\right)^N\left(2\tanh\beta\tilde{B}\right)$$

$$= 2\tanh\beta(B+\Theta m)$$

d) Demonstrieren Sie (grafisch oder näherungsweise durch Taylor-Entwicklung nach kleinen $\beta\Theta m$), dass für $B = 0$ der Fall $m = m_{FM} \neq 0$ eintreten kann (spontane Magnetisierung). *5* P.*
Hinweis: Nutzen Sie die Taylorreihe bis zur dritten Ordnung $\tanh x \approx x - \frac{x^3}{3}$.



Alternative:

Proposition: $x = \tanh(kx)$ hat eine nicht Null Lösung für $k>1$

Beweis:

$$\frac{d}{dx}\left[\tanh(kx) - x\right] = k\,\mathrm{sech}^2(kx) - 1$$

$$\frac{d}{dx}\left[\tanh(kx) - x\right]\Big|_{x=0} = k-1 > 0$$

$\exists\, x_0 > 0,\quad \tanh(kx_0) - x_0 > 0$

Aber $\lim\limits_{x\to\infty} \tanh(kx) = 1$

$\lim\limits_{x\to\infty} x = \infty$

$$\lim_{x\to\infty}\left[\tanh(kx) - x\right] = -\infty$$

$\exists\, x_f > 0,\quad \tanh(kx_f) - x_f < 0$

mit dem Zwischenwertsatz gibt es

$x_0 < x' < x_f$

$\tanh(kx') - x' = 0$ $\square$

e) Zeigen Sie, dass das System für hohe Temperaturen $\beta \to 0$ nur die Lösung $m = 0$ hat. Bei welcher Temperatur T_c ist der Phasenübergang? *5* P.*
Hinweis: Nutzen Sie die Näherung in d) und suchen Sie nach dem Wert für β, an dem $m_{\mathrm{FM}} = 0$ gilt.

Wie oben braucht man $\theta\beta > 1$

Phasenübergang bei $\theta\beta = 1$

$T = \theta / k_B$