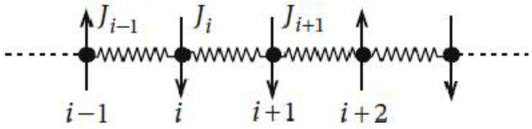

Figure 1: 1-D Ising-Modell-Kette (Quelle: W. Nolting - Grundkurs Theo- retische Physik: Band 6)

Ising Modell

Das Ising Modell ist ein wichtiges Modell der Statistischen Physik, was die Phänomäne des Magnetismus insbesondere Ferromagnetismus beschreiben soll. Damit werden auch Phasenübergänge untersucht, d.h. ob es eine bestimmte kritische Temperatur gibt bei dem ein Phasenübergang in einem Material stattfindet. Mit dem Ising Modell ist es möglich analytisch ein und zwei dimensionale Probleme exakt beschreiben. Für dreidimensionale Probleme werden nummerische approximationen verwendet. Das Ising Modell gilt als das einzige halbwegs realistische Modell für ein Viel-Teilchen-System mit dem man Phasenübergänge mathematisch behandeln kann. Bei vielen meisten Problemuntersuchungen wird immer die gleiche Vorgehensweise verwendet. Man bestimmt die Zustandssumme eines Systems von der aus ist es möglich weitere termondynamische Größen zu bestimmen. Um die Zustandssumme bestimmen zu können benötigt muss man die Gesamtenergie des Systems wissen.

Herleitung der Hamiltonfunktion

Wir betrachten ein System aus vielen Teilchen, die in einer Dimension nebeneinander angeordnet sind mit jeweils einem positiven bzw. einem negativen Spin besitzen (siehe Abbildung 1). Beim Ising Modell wird nur die Spin-Wechselwirkung von benachbarten Teilchen betrachtet.
Die Hamiltonfunktion dieses Systems lautet

$$H = -\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \vec{\mu}\vec{B} \sum_i S_i \tag{1}$$

Dabei ist J_{ij} eine Wechselwirkungskonstante die die magnetische Wechselwirkung zwischen den Teilchen i und j beschreibt. $S_i = \pm 1$ ist dazu da um das Vorzeichen des Spins darzustellen. $\vec{m}u$ ist dabei das Magnetische Moment und $\vec{B}$ die magnetische Flussdichte.
Wir betrachten das Magnetfeld in z-Richtung, d.h. $\vec{B} = (0, 0, B_0)^T$, weiterhin gilt im Ising-Modell nur die Wechselwirkung zwischen benachbarten Teilchen $j = i + 1$, vereinfacht sich die Gleichung (1) insgesamt zu

$$H = -\sum_{i}^{N-1} J_i S_i S_{i+1} - \mu B_0 \sum_i S_i \tag{2}$$

1-D Ising-Modell ohne äußeres Magnetfeld ($B_0 = 0$)

In diesem Abschnitt wollen wir untersuchen ob es bei einer kritischen Temperatur T_C zu einem Phasenübergang kommt. D.h. ob sich eine spontane Magnetisiertung einstellt. Dies war der ursprüngliche Plan von Ernst Ising, als dieses Modell erarbeitet hat.
Wir bestimmen zunächst die kanonische Zustandssumme, die allgemein lautet

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} e^{-\beta E_\alpha} \text{ mit } \beta = \frac{1}{k_B T} \tag{3}$$

Setzen wir nun den Hamiltonoperator aus Gleichung (2) mit $B_0 = 0$ in die Zustandssumme (3) ein, so lautet die von Teilchenzahl abhängige Zustandssumme

$$
\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{S_1=\pm 1} \cdot \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{\beta \sum_i^{N-1} J_i S_i S_{i+1}} \\
&= \sum_{S_1=\pm 1} \cdot \sum_{S_2=\pm 1} e^{\beta J_1 S_1 S_2} \sum_{S_3=\pm 1} e^{\beta J_2 S_2 S_3} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{\beta J_{N-1} S_{N-1} S_N} \\
&= \sum_{S_1=\pm 1} \prod_{i=2}^{N} \left(\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta J_{i-1} S_{i-1} S_i} \right) \\
&= \sum_{S_1=\pm 1} \prod_{i=2}^{N} \left(e^{+\beta J_{i-1} S_{i-1}} + e^{-\beta J_{i-1} S_{i-1}} \right) \\
&= \sum_{S_1=\pm 1} \prod_{i=2}^{N} 2\cosh(\beta J_{i-1} S_{i-1})
\end{aligned}
\tag{4}
$$

Nun möchten wir die erste Summe $\sum_{S_1=\pm 1}$ berechnen. Das ist die Summe für das erste Teilchen das ohne Partner, d.h. ohne Wechselwirkung mit der Wechselwirkungskonstenen $J_0 = 0$ und aus dem Grund müsste Die Exponentialfunktion lauten e^0 und die Summe $\sum_{S_1} e^0 = 2$. Rein mathematisch können wir aus der Gleichung (4) ein Produkt ausklammern

$$
\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{S_1=\pm 1} \left(2\cosh(\beta J_1 S_1) \prod_{i=3}^{N} 2\cosh(\beta J_{i-1} S_{i-1}) \right) \\
&= 2\cosh(\beta J_1 1) \prod_{i=3}^{N} 2\cosh(\beta J_{i-1} S_{i-1}) + 2\cosh(\beta J_1 (-1)) \prod_{i=3}^{N} 2\cosh(\beta J_{i-1} S_{i-1})
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Mit der Relation $\cosh(\pm x) = \cosh(x)$ können wir die zwei Terme wieder zusammenfassen

$$
\begin{aligned}
Z_N &= 2 \cdot 2\cosh(\beta J_1) \prod_{i=3}^{N} 2\cosh(\beta J_{i-1} S_{i-1}) \\
&= 2 \cdot \prod_{i=2}^{N} 2\cosh(\beta J_{i-1} S_{i-1}) = 2 \cdot \prod_{i=2}^{N} 2\cosh(\pm \beta J_{i-1}) \\
&= 2 \cdot \prod_{i=2}^{N} 2\cosh(\beta J_{i-1})
\end{aligned}
\tag{6}
$$

Um die Gleichung (6) weiter zu vereinfachen, betrachten wir eine isotrope Wechselwirkung zwischen den Spins, d.h es gilt $J_1 = J_2 = \cdots = J_j = J$ mit $j = 2...N$. Desweiteren gilt $\cosh(\beta J S_i) = \cosh(\pm \beta J) = \cosh(\beta J)$. Mit diesen Vereinfachungen lautet die Gleichung (6)

$$
Z_N = 2 \cdot \prod_{i=2}^{N} 2\cosh(\beta J) = 2 \cdot \prod_{i=1}^{N-1} 2\cosh(\beta J) = 2 \cdot 2^{N-1} \cosh^{N-1}(\beta J) \tag{7}
$$

Aus Gleichung (7) erhalten wir schlussendlich eine Zustandssumme für ein 1-Dim. Ising-Modell ohne äußeres Magnetfeld

$$
\boxed{Z_N = 2^N \cosh^{N-1}(\beta J)} \tag{8}
$$

Magnetisierung

Um die Magnetisierung bestimmen zu können, müssen wir den Erwartungswert, bzw. den Mittelwert von Spineinstellung $\langle S_i \rangle = \langle S \rangle$ bestimmen, da er laut der Beziehung

$$
M_S(T) = \mu \langle S \rangle \tag{9}
$$

Direkt proportional zu der Magnetisierung ist. Es ist geschickt den Mittelwert bzw. den Erwartungswert der Spineinstellung S_i nicht direkt zu bestimmen sondern über die Spin-Spin-korrelation-Funktion

$$g_{i,i+j} = \langle S_i S_{i+j} \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_{i+j} \rangle \tag{10}$$

Den es gilt für weit auseinander liegende Spins, dass diese unkorreliert sind, d.h $j \to \infty$ geht $g_{i,i+j} \to 0$

$$\begin{aligned} \lim_{j\to\infty} g_{i,i+j} &= \lim_{j\to\infty} \left(\langle S_i S_{i+j} \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_{i+j} \rangle \right) = 0 \\ &\Leftrightarrow \langle S_i S_{i+j} \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_{i+j} \rangle = \langle S \rangle^2 \end{aligned} \tag{11}$$

Für den Erwartungswert $\langle S_i S_{i+j} \rangle$ gilt allgemein

$$\begin{aligned} \langle S_i S_{i+j} \rangle &= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\alpha\}} S_i S_{i+j} e^{\beta \sum_i^{N-1} J_i S_i S_{i+j}} \\ &= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\alpha\}} S_i \cdot 1 \cdot S_{i+j} e^{\beta \sum_i^{N-1} J_i S_i S_{i+j}} \\ &= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\alpha\}} (S_i \underbrace{S_{i+1})(S_{i+1}}_{=1} \underbrace{S_{i+2})(S_{i+2}}_{=1} \underbrace{S_{i+3})}_{=1} \cdots \underbrace{(S_{i+j-1}}_{=1} S_{i+j}) e^{\beta \sum_i^{N-1} J_i S_i S_{i+j}} \end{aligned} \tag{12}$$

Den Erwartungwert können wir durch ableiten der Zustandsumme nach βJ_i gewinnen. Um die Wechselwirkung zwischen Spin i und Spin j zu bekommen, muss man alle Ableitungen zwischen dem i-ten und dem $(i+j-1)$-ten Spin auf die Zustandsumme anwenden.

$$\begin{aligned} \langle S_i S_{i+j} \rangle &= \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial(\beta J_i)} \frac{\partial}{\partial(\beta J_{i+1})} \cdots \frac{\partial}{\partial(\beta J_{i+j-1})} Z_N \\ &\overset{(6)}{=} \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial(\beta J_i)} \frac{\partial}{\partial(\beta J_{i+1})} \cdots \frac{\partial}{\partial(\beta J_{i+j-1})} \left(2 \cdot \prod_{i=2}^{N} 2\cosh(\beta J_{i-1}) \right) \\ &= \cancel{\frac{\cosh(\beta J_1) \cdots \cosh(\beta J_{i-1})}{\cosh(\beta J_1) \cdots \cosh(\beta J_{i-1})}} \times \\ &\quad \times \frac{\sinh(\beta J_i) \cdots \sinh(\beta J_{i+j-1})}{\cosh(\beta J_i) \cdots \cosh(\beta J_{i+j-1})} \\ &\quad \times \cancel{\frac{\cosh(\beta J_{i+j}) \cdots \cosh(\beta J_N)}{\cosh(\beta J_{i+j}) \cdots \cosh(\beta J_N)}} \\ &= \prod_{k=i}^{i+j-1} \tanh(\beta J_k) = \prod_{k=1}^{j} \tanh(\beta J_k) \end{aligned} \tag{13}$$

Wegen Isotroper Wechselwirkung können wir das Produkt aus Gleichung (13) als Potenz schreiben

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle = \tanh^j(\beta J) \tag{14}$$

Laut Gleichung (10) für $j \to \infty$ gilt

$$\langle S \rangle^2 = \langle S_i \rangle \langle S_{i+j} \rangle = \lim_{j\to\infty} \tanh^j(\beta J) \tag{15}$$

Betrachten wir die Magnetisierung aus Gleichung (9), so können wir schreiben

$$M(T) = \mu \lim_{j\to\infty} \tanh^{j/2}(\beta J) \tag{16}$$

- Die Magnetisierung für $T > 0$ ist immer Null, da $\lim_{y\to\infty} \tanh^y(x) = 0$
- Die Magnetisierung für $T = 0$ ist gleich μ da $\lim_{y\to\infty} \tanh^y(\infty) = 1^\infty = 1$

Somit stellt sich *keine spontane Magnetisierung* für endliche Temperaturen ein.

Der Erwartungswert aus Gleichung (15) ist Null für $\beta J = \frac{1}{k_B T} J \neq \infty$, d.h. für jede Temperatur $T \neq 0$. Daraus folgt dass der gemittelte Spinzustand $\langle S \rangle$ auch Null ist. Was zu erwarten ist, da bei endlichen Temperaturen die Spinzustände zufällig chaotisch zwischen $+1$ und -1 verteilt sind. Somit muss der statistische Mittelwert bei Null liegen.

1D-Ising-Modell mit Magnetfeld $B_0 \neq 0$

Nun wollen wir die Zustandssumme für das 1D-Ising-Modell berechnen. Dazu benutzen wir die sogenannte Transfer-Matrix-Methode. Als Randbedingung gilt auch weiterhin dass jedes Spin nur mit seinem Nachbarn wechselwirken kann und die Wechselwirkung ist jetzt von beginn an isotrop, das bedeutet $J_i = J$. Hinzu kommt dass die Kette geschlossen wird, d.h. Das letzte Element ist nun benachbart mit dem ersten Element

$$S_{N+1} = S_1 \tag{17}$$

Die Vollständige Hamiltonfunktion aus Gleichung (2) lautet

$$H = -J \sum_{i}^{N-1} S_i S_{i+1} - \mu B_0 \sum_i S_i \tag{18}$$

Die allgemeine Zustandssumme lautet

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\{S\}} e^{\beta J \sum_i^{N-1} S_i S_{i+1} + \beta \mu B_0 \sum_i S_i} \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{(\beta J S_1 S_2 + \beta \mu B_0 S_1) + (\beta J S_2 S_3 + \beta \mu B_0 S_2) + \cdots + (\beta J S_N S_{N+1} + \beta \mu B_0 S_N)} \end{aligned} \tag{19}$$

Mit der Randbedinung aus Gleichung (17) ersetzen wir S_{N+1} durch S_1 und erhalten

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{(\beta J S_1 S_2 + \beta \mu B_0 S_1) + (\beta J S_2 S_3 + \beta \mu B_0 S_2) + \cdots + (\beta J S_N S_1 + \beta \mu B_0 S_N)} \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{(\beta J S_1 S_2 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_1+S_1)) + (\beta J S_2 S_3 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_2+S_2)) + \cdots + (\beta J S_N S_1 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_N+S_N))} \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{(\beta J S_1 S_2 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_1+S_2)) + (\beta J S_2 S_3 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_2+S_3)) + \cdots + (\beta J S_N S_1 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_N+S_1))} \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{(\beta J S_1 S_2 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_1+S_2))} e^{(\beta J S_2 S_3 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_2+S_3))} \cdots e^{(\beta J S_N S_1 + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_N+S_1))} \end{aligned} \tag{20}$$

Nun definieren wir die sogenannte Transfer-Funktoin $T_{i,i+1}$

$$T_{i,i+1} = e^{(\beta J S_i S_{i+1} + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_i + S_{i+1}))} \tag{21}$$

Damit lautet die Gleichung (20)

$$Z_N = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} T_{1,2} \cdot T_{2,3} \cdots T_{N,1} \tag{22}$$

Die Transfer-Funktion $T_{i,i+1}$ kann man als eine 2×2-Matrix schreiben, da es 4 verschiedene Kombinationen bei 2 interaggierenden Spins an Spinzuständen gibt

i	i+1	$e^{(\beta J S_i S_{i+1} + \beta \mu B_0 \frac{1}{2}(S_i + S_{i+1}))}$
$\uparrow$	$\uparrow$	$e^{\beta J + \beta \mu B_0}$
$\uparrow$	$\downarrow$	$e^{-\beta J}$
$\downarrow$	$\uparrow$	$e^{-\beta J}$
$\downarrow$	$\downarrow$	$e^{\beta J - \beta \mu B_0}$

Table 1: Mögliche Spin-Kombinationen

Damit lässt sich die Transfer-Matrix schreiben als

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow \\ \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta \mu B_0} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta \mu B_0} \end{pmatrix} \tag{23}$$

Mit den zugehörigen Spinzuständen

$$|S_i\rangle = |\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad |S_i\rangle = |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{24}$$

Mit Hilfe der Transfer-Matrix können wir die Transfer-Funktion schreiben

$$T_{i,i+1} = \langle S_i|\hat{T}|S_{i+1}\rangle \tag{25}$$

Setzen wir nun die Definition (25) in die Zustandsfunktion aus Gleichung (22) ein

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{S_1=\pm1}\sum_{S_2=\pm1}\cdots\sum_{S_N=\pm1} T_{1,2}\cdot T_{2,3}\cdots T_{N,1} \\ &= \sum_{S_1=\pm1}\sum_{S_2=\pm1}\cdots\sum_{S_N=\pm1} \langle S_1|\hat{T}\underbrace{|S_2\rangle\langle S_2|}_{\mathbb{1}_2}\hat{T}\underbrace{|S_3\rangle\quad}_{\mathbb{1}_2}\cdots\underbrace{\quad\langle S_N|}_{\mathbb{1}_2}\hat{T}|S_1\rangle \end{aligned} \tag{26}$$

Aufgrund der Vollständigkeits-Relation $\sum_{S_i}|S_i\rangle\langle S_i| = \mathbb{1}_2$ kann die Zustandssumme (26) weiter vereinfacht werden

$$Z_N = \sum_{S_1=\pm1}\langle S_1|\hat{T}^N|S_1\rangle = \langle\uparrow|\hat{T}^N|\uparrow\rangle + \langle\downarrow|\hat{T}^N|\downarrow\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{T}^N\right) \tag{27}$$

Da die Spur unabhängig von der gewählten Basis ist, können wir die Matrix $\hat{T}$ diagonalisieren um weitere Erkenntnisse zu gewinnen. Die Zustandssumme ist dann die Summe der Diagonalelemente bzw. der Eigenwerte der Matrix

$$Z_N = \mathrm{Tr}\left(\hat{T}^N\right) = \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}^N\right) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \tag{28}$$

Die Eigenwerte λ_i der Matrix werden durch die Bedingung $det|\hat{T} - \lambda\cdot\mathbb{1}_2| \stackrel{!}{=} 0$ berechnet

$$\begin{aligned} &\left(e^{\beta J+\beta\mu B_0} - \lambda\right)\left(e^{\beta J-\beta\mu B_0} - \lambda\right) - e^{-2\beta J} \stackrel{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow\ & e^{2\beta J} - \lambda e^{\beta J+\beta\mu B_0} - \lambda e^{\beta J-\beta\mu B_0} + \lambda^2 - e^{-2\beta J} = 0 \\ \Leftrightarrow\ & \lambda^2 - \lambda(\underbrace{e^{\beta J+\beta\mu B_0} + \lambda e^{\beta J-\beta\mu B_0}}_{e^{\beta J}2\cosh(\beta\mu B_0)}) + \underbrace{e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}}_{2\sinh(2\beta J)} = 0 \\ \Leftrightarrow\ & \lambda^2 - \lambda 2e^{\beta J}\cosh(\beta\mu B_0) + 2\sinh(2\beta J) = 0 \end{aligned} \tag{29}$$

Mit Hilfe der Mitternachtsformel folgt

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \frac{e^{\beta J}2\cosh(\beta\mu B_0) \pm \sqrt{e^{2\beta J}4\cosh^2(\beta\mu B_0) - 4\cdot 2\sinh(2\beta J)}}{2} \\ &= e^{\beta J}\cosh(\beta\mu B_0) \pm \sqrt{e^{2\beta J}\cosh^2(\beta\mu B_0) - e^{2\beta J} + e^{-2\beta J}} \\ &= e^{\beta J}\left[\cosh(\beta\mu B_0) \pm \sqrt{\underbrace{\cosh^2(\beta\mu B_0) - 1}_{\sinh^2(\beta\mu B_0)} + e^{-4\beta J}}\right] \end{aligned} \tag{30}$$

Somit erhalten wir zwei Eigenwerte

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J}\left[\cosh(\beta\mu B_0) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta\mu B_0) + e^{-4\beta J}}\right] \tag{31}$$

Betrachten wir zusätzlich den Limes der Zustandssumme für $N\to\infty$, dann können wir sagen dass nur der erste Eigenwert λ_1 der der größere Eigenwert ist, gegenüber dem kleineren λ_2 dominiert. Denn es gilt

$$Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N = \lambda_1^N \left(1 + \frac{\lambda_2^N}{\lambda_1^N}\right) \overset{N\to\infty}{=} \lambda_1^N = e^{\beta J N} \left[\cosh(\beta\mu B_0) + \sqrt{\sinh^2(\beta\mu B_0) + e^{-4\beta J}}\right]^N \tag{32}$$

Betrachte die Gleichung (32) ohne Magnetfeld $B_0 = 0$ so ergibt das

$$Z_N(T, B_0 = 0) = e^{\beta J N} \left[1 + \sqrt{e^{-4\beta J}}\right]^N = e^{\beta J N} + e^{-\beta J N} = 2^N \cosh^N(\beta J) \tag{33}$$

Somit erhalten wir die selbe Zustandssumme im termodynamischen Limes ohne Magnetfeld wie Gleichung (8).