

E_7. Ergänzungen zu Kapitel 7

1 E_7.1 Ising Spin-1/2 System ($D = 1$)

2 E_7.2 Ising Spin-1/2 System ($D = 2$)

E_7.1 Ising Spin-1/2 System ($D = 1$)

Gegeben:

- Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle}' s_i s_j - H_m \sum_i s_i$$

- Spineinstellungen $s_i = \pm 1$ (diskretes Modell)
- eindimensionale Kette, N Spins,
periodische Randbedingungen: $s_{N+1} \equiv s_1$
- externes Feld H_m im folgenden mit H bezeichnet

Gesucht:

- thermodynamische Eigenschaften

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} &= -J \sum'_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i \\
 &= -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \frac{1}{2} H \sum_{i=1}^N (s_i + s_{i+1})
 \end{aligned}$$

Berechnung der Zustandssumme Z mit $\beta = 1/(k_B T)$

$$\begin{aligned}
 Z = Z(T, H, N) &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}) \\
 &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp \left\{ \beta \sum_{i=1}^N [J s_i s_{i+1} + (1/2) H (s_i + s_{i+1})] \right\} \\
 &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \{ \beta [J s_i s_{i+1} + (1/2) H (s_i + s_{i+1})] \}
 \end{aligned}$$

jeder der Faktoren, $\exp\{\beta [Js_i s_{i+1} + (1/2)H(s_i + s_{i+1})]\}$ nimmt für die verschiedenen Möglichkeiten der Spineinstellungen ($s_i = \pm 1$ und $s_{i+1} = \pm 1$) vier Werte an, die man zu einer Matrix \mathcal{T} (die s.g. **Transfermatrix**) mit Elementen

$$\mathcal{T}_{s_i, s_{i+1}} = \exp\{\beta [Js_i s_{i+1} + (1/2)H(s_i + s_{i+1})]\}$$

zusammenfassen kann:

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} \underbrace{\exp[\beta(J+H)]}_{s_i=1, s_{i+1}=1} & \underbrace{\exp[-\beta J]}_{s_i=1, s_{i+1}=-1} \\ \underbrace{\exp[-\beta J]}_{s_i=-1, s_{i+1}=1} & \underbrace{\exp[\beta(J-H)]}_{s_i=-1, s_{i+1}=-1} \end{pmatrix}$$

somit kann man die Zustandssumme folgendermaßen schreiben:

$$Z(T, H, N) = \sum_{s_1 = \pm 1} \left(\sum_{s_2 = \pm 1} \cdots \sum_{s_N = \pm 1} \mathcal{T}_{s_1, s_2} \mathcal{T}_{s_2, s_3} \cdots \mathcal{T}_{s_{N-1}, s_N} \mathcal{T}_{s_N, s_1} \right)$$

Interpretation dieses Ergebnisses:

- die inneren ($N - 1$) Summen innerhalb der runden Klammern entsprechen einem Matrixprodukt von N \mathcal{T} -Matrizen; dieser Klammerausdruck ist somit $(\mathcal{T}^N)_{s_1, s_1}$
- die äußere Summe über $s_1 = \pm 1$ entspricht dann der **Spur über \mathcal{T}^N**

man erhält schließlich für die kanonische Zustandssumme:

$$Z(T, H, N) = \text{Sp}(\mathcal{T}^N)$$

da \mathcal{T} offensichtlich eine symmetrische 2×2 Matrix ist, besitzt sie zwei reelle Eigenwerte, λ_1 und λ_2 :

$$\lambda_{1,2} = \exp(\beta J) \left[\cosh(\beta H) \pm \sqrt{\cosh^2(\beta H) - 2 \exp(-2\beta J) \sinh(2\beta J)} \right]$$

damit erhält man

$$Z(T, H, N) = (\lambda_1^N + \lambda_2^N)$$

und

$$G(T, H, N) = -k_B T \ln \left[\lambda_1^N + \lambda_2^N \right]$$

sei $\lambda_1 > \lambda_2$, dann folgt

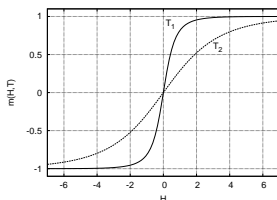
$$G = -k_B T \ln \left[\lambda_1^N + \lambda_2^N \right] = -k_B T \ln \left[\lambda_1^N \left(1 + \underbrace{(\lambda_2/\lambda_1)^N}_{<1} \right) \right]$$

mit $N \rightarrow \infty$ strebt die innere, runde Klammer gegen 1, somit ist $G(T, H, N)$ extensiv, also

$$g(T, H) = \lim_{N \rightarrow \infty} G/N = -k_B T \ln \lambda_1 < \infty$$

aus G (bzw. g) erhält man im thermodynamischen Grenzwert (also für $N \rightarrow \infty$) für die Magnetisierung pro Teilchen, $m = M/T$

$$m(T, H) = - \left(\frac{\partial(G/N)}{\partial H} \right)_T = \frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp[-4\beta J]}}$$



Magnetisierung pro Teilchen für ein eindimensionales Ising-Modell als Funktion von H (in willkürlichen Einheiten) für zwei verschiedenen Temperaturen T_1 und T_2 , mit $T_1 < T_2$; aus Ref. [1.8].

schließlich lassen sich auch **Korrelationsfunktionen** mit Hilfe dieses Algorithmus relativ leicht berechnen (vgl. Ref. [1.7])

Hinweis:

die Transfermatrixmethode ist für viele magnetische Modellsysteme anwendbar; dabei ist das **Theorem von Perron-Frobenius** von Relevanz. Transfermatrizen gehören zu einer Gruppe von Matrizen, für die folgendes gilt: es gibt einen größten, **reellen** Eigenwert λ_1 ; weiters gilt: $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots$, wobei die λ_i für $i \geq 2$ nicht reell sein müssen (vgl. Ref. [1.7])

E_7.2 Ising Spin-1/2 System ($D = 2$)^{*}

(a) analytische Lösung

Gegeben:

- Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = -J \sum'_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

- Spineinstellungen $s_i = \pm 1$ (diskretes Modell)
- quadratisches Gitter, $N = n^2$ Spins,
periodische (toroidale) Randbedingungen
- kein Feld !!

Gesucht:

- thermodynamische Eigenschaften

Ergebnisse (ohne Rechnung; vgl. Ref. [1.4, 1.5, 1.8]):

- freie Enthalpie

$$\beta \frac{1}{N} G = -\ln[2 \cosh(2\beta J)] - \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\Phi \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \Phi} \right) \right]$$

- innere Energie

$$\beta \frac{1}{N} E = -2J \tanh(2\beta J) + \frac{\kappa}{2\pi} \frac{d\kappa}{d\beta} \int_0^\pi d\Phi \frac{\sin^2 \Phi}{\Delta(1 + \Delta)}$$

- kritischer Punkt mit kritischer Temperatur T_c

$$k_B T_c \sim 2.269J$$

- für die Wärmekapazität C gilt bei $T \sim T_c$

$$\frac{1}{k_B} C(T) \sim \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{k_B T_c} \right)^2 \left[-\ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| + \ln \left(\frac{k_B T_c}{2J} \right) - \left(1 + \frac{\pi}{4} \right) \right] \quad (1)$$

mit

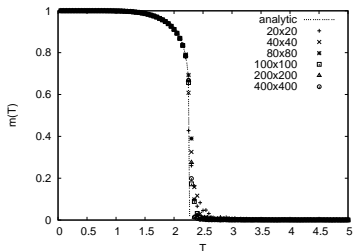
$$\kappa = 2 [\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J)]^{-1} \quad \Delta = \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \Phi}$$

- (spezifische) Magnetisierung m

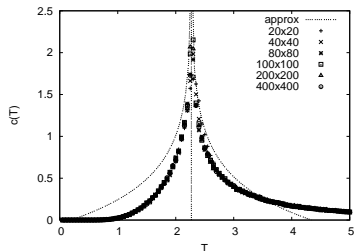
ähnlich wie für $D = 1$ (nur mit erheblich mehr Rechenaufwand) ergibt sich die Magnetisierung pro Spin, $m = M/N$, zu

$$m(T) = \left[\frac{(1+x^2)(1-6x^2+x^4)^{1/2}}{(1-x^2)^2} \right]^{1/4} \quad \text{mit} \quad x = \exp[-2\beta J] \quad (2)$$

- (b) Ergebnisse von Monte Carlo Simulationen
aus der Projektarbeit von Thomas Garschall (Ref. [1.8]):
Magnetisierung und Wärmekapazität

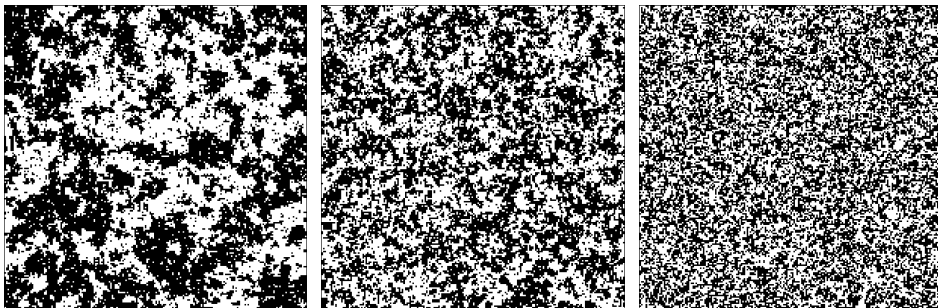


Magnetisierung pro Spin, $m(T)$, für ein zwei-dimensionales Ising Spin-Modell als Funktion der Temperatur T . Ergebnisse von Monte Carlo Simulationen für verschiedene Ensemblegrößen (wie angegeben); strichlierte Linie: **analytisches (exaktes)** Ergebnis – vgl. Gleichung (2).



Wärmekapazität pro Spin, $c(T)$, für ein zwei-dimensionales Ising Spin-Modell als Funktion der Temperatur T . Ergebnisse von Monte Carlo Simulationen für verschiedene Ensemblegrößen (wie angegeben); strichlierte Linie: **Näherungsausdruck** der analytischen Lösung – vgl. Gleichung (1).

Spinkonfigurationen



Spinkonfigurationen eines zwei-dimensionalen Ising Spin-Modells aus einer Monte Carlo Simulation nach jeweils 500 Simulationsschritten für drei verschiedene Temperaturen: $T = 2.4J/k_B$ (links), $T = 3.0J/k_B$ (Mitte) und $T = 5.0J/k_B$ (rechts). Systemgröße: 200×200 Spins. Weiße und schwarze Kästchen entsprechen Spins mit gegensätzlicher Orientierung.

Literatur

- 1.1 H.E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press (Oxford, 1971).
- 1.2 C. Kittel, *Elementary Statistical Physics*, Wiley (New York, 1958).
- 1.3 E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).
- 1.4 L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- 1.5 K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley (New York, 1987), 2. Auflage.
- 1.6 R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press (London, 1989).
- 1.7 J.M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* Clarendon Press (Oxford, 1992).
- 1.8 T. Garschall, Projektarbeit aus "Statistischer Physik", TU Wien (2009); (vgl. <http://smt.tuwien.ac.at/extra/teaching/statphys2/garschall.pdf>).