7. Ensembletheorie (klassische diskrete Systeme)

1. 7.1 Klassische diskrete Systeme
2. 7.2 Ising-Modell
3. 7.3 Ensembletheorie

7.1 Klassische diskrete Systeme

betrachten klassische Syteme im $\mathbb{Z}^D$, mit $D = 1, 2, 3$

- klassische Momente (z.B. magnetische Momente), die an Gitterpunkten lokalisiert sind
  das Gitter ist entweder der $\mathbb{Z}^D$, oder ein Teilraum Λ ($\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^D$)
- Einstellungen der Momente sind Elemente einer Menge $\mathcal{S}$
  Beispiele:
  - $\mathcal{S} = \{-1, +1\}$ (Ising-Modell; sh. später)
  - $\mathcal{S} = \{\mathbf{n} \in \mathbb{R}^D, |\mathbf{n}| = 1\}$
- Mikrozustand: Konfiguration von Einstellungen der Momente
  sei $\mathbf{x} \in \Lambda \subseteq \mathbb{Z}^D$, dann wird folgende Zuordnung durchgeführt: $\mathbf{x} \mapsto s_{\mathbf{x}} \in \mathcal{S}$
  eine Konfiguration entspricht also der Menge $\{s_{\mathbf{x}}\}_{\mathbf{x} \in \Lambda}$
- Bewegungsgleichungen: im allgemeinen wird keine Bewegung im klassischen Sinn betrachtet
  System durch Hamilton-Funktion $\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{s_{\mathbf{x}}\})$ für $\mathbf{x} \in \Lambda$ beschrieben

7.2 Ising-Modell

von E. Ising ($\sim$ 1920) eingeführt
zugrundeliegende Hamilton-Funktion

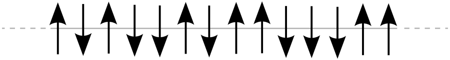
$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{s_{\mathbf{x}}\}) = -J \sum_{\mathbf{x},\mathbf{y} \in \Lambda} s_{\mathbf{x}} s_{\mathbf{y}} - H \sum_{\mathbf{x} \in \Lambda} s_{\mathbf{x}}$$

- J ist die s.g. Kopplungsstärke
- H stellt ein äußeres 'Feld' (z.B. Magnetfeld) dar
- Vorzeichen vor den Termen sind Konvention
- die Summe $\sum_{\mathbf{x},\mathbf{y} \in \Lambda} s_{\mathbf{x}} s_{\mathbf{y}}$ wird oft auf nächste Nachbarn eingeschränkt

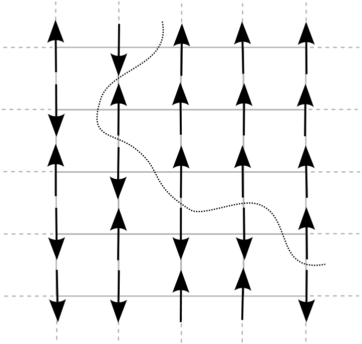
Bemerkungen

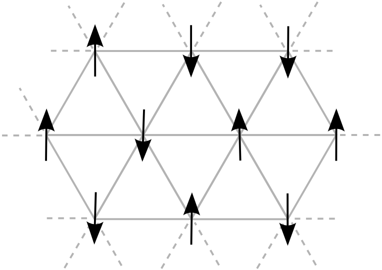
- Ising-Modell mit $\mathcal{S} = \{-1, +1\}$ kann für $D = 1$ und $D = 2$ exakt (d.h. analytisch) gelöst werden
- kann für $D > 1$ einen ferromagnetischen Phasenübergang beschreiben
- Ising-Modelle (auch verallgemeinert auf anderen Mengen $\mathcal{S}$) sind viel verwendete und sehr beliebte Testsysteme in der Statistischen Physik

1-dimensionales Ising System mit $\mathcal{S} = \{-1, +1\}$:



2-dimensionale Ising Systeme mit $\mathcal{S} = \{-1, +1\}$:
links: quadratisches Gitter; geordnetes und ungeordnetes Phasengebiet
rechts: dreieckiges Gitter.





7.3 Ensembletheorie

- Verteilungsfunktion (Phasenraumdichte) $\rho_{\mathrm{E}}(\{s_{\mathsf{x}}\})$
  E (= 'm', 'k', 'g') spezifiziert das Ensemble

$$\rho_{\mathrm{E}}(\{s_{\mathsf{x}}\}) \geq 0 \qquad \sum_{\{s_{\mathsf{x}}\}_{\mathsf{x}\in\Lambda}} \rho_{\mathrm{E}}(\{s_{\mathsf{x}}\}) = 1$$

- Mittelwerte, höhere Momente und Streuung
  sei $A = A(\{s_{\mathsf{x}}\})$ eine Observable, dann sind die höheren Momente n ($n = 1$: Mittelwert) und die Streuung definiert über

$$\bar{A}^n = \langle A^n \rangle_{=} \sum_{\{s_{\mathsf{x}}\}_{\mathsf{x}\in\Lambda}} \rho_{\mathrm{E}}(\{s_{\mathsf{x}}\}) A^n(\{s_{\mathsf{x}}\})$$

und

$$(\Delta A)_{\mathrm{E}} = \langle (A - \langle A \rangle_{\mathrm{E}})^2 \rangle_{\mathrm{E}}^{1/2} = (\langle A^2 \rangle_{\mathrm{E}} - \langle A \rangle_{\mathrm{E}}^2)^{1/2}$$

- mikrokanonisches Ensemble
  relativ schwerfällig, weil bei der Auswahl der $\{s_{\mathsf{x}}\}$ stets die Bedingung

$$\mathcal{H}(\{s_{\mathsf{x}}\}) = E$$

  erfüllt werden muß
- kanonisches Ensemble
  'angenehmes' Ensemble für klassische diskrete Systeme

$$\rho_k(\{s_{\mathsf{x}}\}) = \frac{1}{Z_k} \exp[-\beta \mathcal{H}(\{s_{\mathsf{x}}\})]$$

  mit

$$Z_k = \sum_{\{s_{\mathsf{x}}\}_{\mathsf{x} \in \Lambda}} \exp[-\beta \mathcal{H}(\{s_{\mathsf{x}}\})]$$

  weiters

$$F(T, N) = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z_k$$

- großkanonisches Ensemble
  Formalismus ergibt sich aus der Ensembletheorie im kontinuierlichen Fall, unter Verwendung von Analogieschlüssen wie im kanonischen Ensemble