1. *Ein einfaches Modell, welches Paramagnetismus beschreibt, besteht aus einem Spin-1/2 Teilchen mit magnetischem Moment $\vec{\mu} \propto \vec{S}$. In einem äusseren Magnetfeld $\vec{B}$ richtet sich der Spin parallel oder anti-parallel zum Magnetfeld aus, so dass sich je nach Ausrichtung die zwei Energieniveaus $\epsilon_\pm = \pm\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ ergeben.*

   (a) *Berechne die Zustandssumme des 1-Teilchen-Systems und die Wahrscheinlichkeiten, mit welchen die beiden Ausrichtungen auftreten.*

   Lösung: Der Spin kann entweder parallel oder antiparallel zur Richtung des Magnetfeldes ausgerichtet sein. Mit $\vec{\mu} \propto \vec{S}$ können wir die Energieniveaus somit schreiben als $\epsilon_\pm = \pm\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \pm\mu B$, wobei $B = |\vec{B}|$, $\mu = |\vec{\mu}|$. Die Zustandssumme berechnet sich als

$$Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta\epsilon_i} = e^{-\beta\epsilon_+} + e^{-\beta\epsilon_-} = e^{-\beta\mu B} + e^{\beta\mu B} \,.$$

   Die Warscheinlichkeiten ergeben sich als

$$p_\pm(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta\epsilon_\pm} = \frac{e^{\mp\beta\mu B}}{e^{-\beta\mu B} + e^{\beta\mu B}} = \frac{1}{1 + e^{\pm 2\beta\mu B}} \,.$$

   (b) *Berechne und skizziere die mittlere Magnetisierung $m(T)$ und die magnetische Suszeptibilität $\chi_m(T)$.*

   Lösung: Die mittlere Magnetisierung berechnet sich als

$$m(T) = \sum_i \mu_i p_i = -\mu \cdot p_- + \mu \cdot p_+ = \mu \frac{e^{+\beta\mu B} - e^{-\beta\mu B}}{e^{-\beta\mu B} + e^{\beta\mu B}} = \mu \tanh(\beta\mu B) \,.$$

   Die magnetische Suszeptibilität berechnen wir als

$$\chi_m(T) = \left.\frac{\partial m(T)}{\partial B}\right|_{B=0} = \left.\mu^2\beta \frac{1}{\cosh^2(\beta\mu B)}\right|_{B=0} = \mu^2\beta \,.$$

   Für N Teilchen multipliziert sich $m(T)$ einfach mit N, $m(T) \to N \cdot m(T)$. Dasselbe gilt für die magnetische Suszeptibilität.
   In Abbildung 1 ist die magnetische Suszeptibilität $\chi_m(T)$ als Funktion von T dargestellt sowie die Magnetisierung $m(B)$ als Funktion des externen Magnetfeldes B. Die Magnetisierung ist für unterschiedliche Temperaturen dargestellt und es ist klar ersichtlich, dass bei $T = 0$ ein Phasenübergang stattfindet (die rote Linie entspricht $T = 0$).

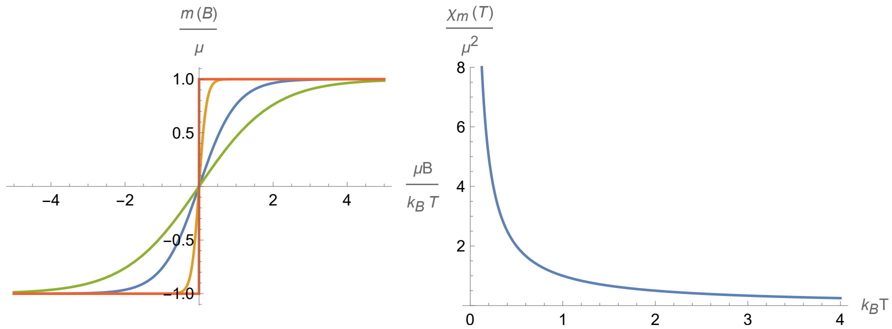

Abbildung 1: Magnetisierung $m(B)$ für verschiedene Temperaturen und magnetische Suszeptibilität $\chi_m(T)$ in geeigneten Einheiten.

2. *Wir betrachten das Isingmodell in $d = 1$ Dimension auf einem periodischen Gitter mit L Gitterpunkten ohne ein externes Magnetfeld. Der Hamiltonoperator ist dann durch*

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

gegeben.

(a) *Berechne die klassische Zustandssumme*

$$Z = \sum_s \exp(-\beta \mathcal{H}[s])$$

als Funktion der inversen Temperatur $\beta = 1/k_B T$ und der Gitterlänge L.

Lösung: Wir berechnen die Zustandssumme mit Hilfe der Transfermatrix-Methode. An jedem Gitterpunkt i kann das System zwei Zustände $s_i = \pm 1$ annehmen. Die Transfermatrix T_{ij} gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit der Übergang vom Zustand s_i auf dem Gitterpunkt i zum Zustand s_j auf dem benachbarten Gitterpunkt j vorkommt,

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} e^{+J\beta} & e^{-J\beta} \\ e^{-J\beta} & e^{+J\beta} \end{pmatrix} .$$

Da die Transfermatrix translationsinvariant ist, lässt sich die Zustandssumme für ein periodisches Gitter der Länge L wie folgt schreiben:

$$Z = \sum_s \exp(-\beta \mathcal{H}[s]) = \operatorname{Tr} T^L .$$

Dies lässt sich durch Diagonalisieren der Transfermatrix explizit ausrechnen. Die Eigenwerte von T ergeben sich zu

$$\lambda_\pm = \begin{cases} 2\cosh J\beta \\ 2\sinh J\beta \end{cases}$$

und damit

$$Z = \operatorname{Tr} T^L = 2^L (\cosh^L J\beta + \sinh^L J\beta) .$$

(b) *Berechne den Erwartungswert der Energie $E = \langle \mathcal{H} \rangle$.*

Lösung: Der Erwartungswert der Energie ergibt sich wie üblich durch

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -LJ \cdot \frac{\sinh^{L-1} J\beta \cdot \cosh J\beta + \cosh^{L-1} J\beta \cdot \sinh J\beta}{\sinh^L J\beta + \cosh^L J\beta} .$$

(c) *Bestimme die freie Energie pro Spin im thermodynamischen Limes.*

Lösung: Die Anzahl Spins im System haben wir mit L bezeichnet. Der thermodynamische Limes einer intensiven Grösse $g(L)$ ist dann definiert durch

$$\lim_{L\to\infty} g(L).$$

Die freie Energie pro Spin $f(L) = F/L = k_B T \ln(Z)/L$ kann nun geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
\frac{F}{L} &= \frac{k_B T \ln(Z)}{L} \\
&= \frac{k_B T \ln(\lambda_+^L + \lambda_-^L)}{L} \\
&= \frac{k_B T \ln\left(\lambda_+^L \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^L\right]\right)}{L} \\
&= k_B T \ln(\lambda_+) + \frac{k_B T \ln\left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^L\right)}{L} .
\end{aligned}$$

Für das Verhältnis der Eigenwerte gilt

$$\lambda_-/\lambda_+ \leq 1 ,$$

wobei die Gleichheit nur für $J = 0$ gilt. Im thermodynamischen Limes überlebt darum nur der grösste Eigenwert und wir erhalten

$$\begin{aligned}
\lim_{L\to\infty} \frac{F}{L} &= k_B T \ln(\lambda_+) + \lim_{L\to\infty} \frac{k_B T \ln\left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^L\right)}{L} \\
&= k_B T \ln(\lambda_+) \\
&= k_B T \ln\left(2\cosh(J\beta)\right) .
\end{aligned}$$

3. (a) *Wiederhole die Rechnungen in Aufgabe 1 unter der Annahme, dass nun ein äusseres Magnetfeld $B \neq 0$ eingeschaltet ist.*

Lösung: Wir schalten nun ein äusseres Magnetfeld an, welches die Ausrichtung der Spins beeinflusst. Dies kann durch den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}[s] = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + B \sum_{\langle i \rangle} s_i$$

beschrieben werden, wobei B eine skalare Grösse ist, welche die Stärke und Richtung des äusseren Magnetfeldes angibt. Die dazugehörige Transfermatrix kann analog zu Aufgabe 1 erstellt werden. Das Resultat ist

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} e^{+(J-B)\beta} & e^{-J\beta} \\ e^{-J\beta} & e^{+(J+B)\beta} \end{pmatrix} ,$$

da bei zwei benachbarten Spins mit gegensätzlicher Ausrichtung der Faktor des externen Magnetfeldes gerade wegfällt. Die Eigenwerte der Matrix T sind

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

Als Überprüfung können wir $B = 0$ einsetzen und erhalten die Eigenwerte aus Aufgabe 2. Die Zustandssumme kann identisch berechnet werden und es gilt

$$Z = \operatorname{Tr} T^L = \lambda_+^L + \lambda_-^L ,$$

mit den Eigenwerten aus Gleichung (1). Um die Energie zu erhalten leiten wir auch hier den Logarithmus der Zustandssumme nach β ab

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln(Z) .$$

Wir verzichten hier auf den expliziten Ausdruck der Energie, da sich dieser nicht in einer kurzen Form schreiben lässt.

Es gilt noch für $B \neq 0$ die freie Energie pro Spin im thermodynamischen Limes auszurechnen. Die Rechnung aus Aufgabe 2(c) kann hier analog angewandt werden, da auch hier

$$\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \leq 1$$

gilt. Die Gleichheit ist nur bei $J = B = 0$ erfüllt und darum trägt im thermodynamischen Limes nur der grösste Eigenwert bei. Somit erhalten wir

$$\lim_{L\to\infty} \frac{F}{L} = k_B T \ln(\lambda_+) = k_B T \ln\left(e^{J\beta}\left[\cosh(B\beta) + \sqrt{\sinh^2(B\beta) + e^{-4J\beta}}\right]\right) .$$

(b) *Bestimme zusätzlich die Magnetisierung des Systems und vergleiche das Resultat mit demjenigen aus der Molekularfeldnäherung.*

Lösung: Die mittlere Magnetisierung pro Spin ist

$$m = \langle \frac{1}{L} \sum_{\langle i \rangle} s_i \rangle .$$

Mit $f = \ln(\lambda_+)/\beta$ im thermodynamischen Limes ergibt sich für die mittlere Magnetisierung

$$\begin{aligned} m &= -\frac{1}{\beta L}\frac{\partial \ln(Z)}{\partial B} \\ &= \frac{1}{L}\frac{\partial F}{\partial B} \\ &= \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial B}\ln(\lambda_+) \\ &= \frac{1}{\beta\lambda_+}\frac{\partial}{\partial B}\lambda_+ \\ &= \frac{\sinh(B\beta)}{\sqrt{\sinh^2(B\beta)+e^{-4\beta J}}} \,. \end{aligned}$$

Wir sehen, dass es im eindimensionalen Ising Modell bei $B = 0$ für alle Temperaturen $T > 0$ keine spontane Magnetisierung gibt. Im Gegensatz dazu erhalten wir aus der Molekularfeldnäherung

$$m = \tanh\left(\beta(B + qJm)\right) \,,$$

wobei in $d = 1$ Dimensionen $q = 2$ ist. Demnach existiert für ein verschwindendes externes Magnetfeld $B = 0$ eine spontane Magnetisierung falls $\beta qJ \geq 1$ ist. Die kritische Temperatur ist dann gegeben durch

$$\beta qJ = 1 \quad \Rightarrow \quad T_c = \frac{qJ}{k_B} \,.$$

Die Näherung lässt also eine Magnetisierung zu, obwohl wir aus der exakten Lösung wissen, dass $m = 0$ für alle $T > 0$ gilt. Für dieses System ist die Molekularfeldnäherung also nicht besonders genau.

4. *Eindimensionales Isingmodell ohne ein externes Magnetfeld:*

   (a) *Berechne die 2-Punkt-Korrelationsfunktion*

   $$C(i-j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

   als Funktion der Temperatur T und der Anzahl Gitterpunkte L.

   Lösung: Wir benutzen zuerst die Translationsinvarianz der Theorie und schreiben

   $$C(i) = \langle s_0 s_i \rangle - \langle s_0 \rangle \langle s_i \rangle \,.$$

   Dann nutzen wir aus, dass in einer Dimension $m(T) = 0\,, \forall\, T > 0$ (bei ausgeschaltetem Magnetfeld sogar $\forall\, T \geq 0$), also $\langle s_0 \rangle = \langle s_i \rangle = 0$ gilt.

Wir benutzen nun wiederum die Transfermatrixmethode, berücksichtigen aber zusätzlich die beiden Einschübe des Operators $\hat{S}$ an den Stellen 0 und i. Der Operator in Matrixform lässt sich schreiben als

$$S_{ss'} = \langle s|\hat{S}|s'\rangle = \begin{pmatrix} \langle +1|\hat{S}|s+1\rangle & \langle +1|\hat{S}|-1\rangle \\ \langle -1|\hat{S}|s+1\rangle & \langle -1|\hat{S}|-1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Unter Diagonalisierung der Transfermatrix $U \cdot T \cdot U^\dagger = D$ nimmt S die Form

$$U \cdot S \cdot U^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

an und wir können die Korrelationsfunktion wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \langle s_0 s_i\rangle &= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left[S_0 T^i S_i T^{L-i}\right] \\ &= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left[S_0 U^\dagger D^i U S_i U^\dagger T^{L-1} U\right] \\ &= \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^{L-i}\right], \end{aligned}$$

wobei $\lambda_\pm = \exp\{+\beta J\} \pm \exp\{-\beta J\}$. Nach einigen algebraischen Umformungen erhalten wir schliesslich

$$\langle s_0 s_i\rangle = \frac{(\tanh\beta J)^i + (\tanh\beta J)^{L-i}}{1 + (\tanh\beta J)^L}.$$

(b) *Berechne nun den thermodynamischen Limes $L \to \infty$ der Korrelationsfunktion.*

Lösung: Im thermodynamischen Limes überlebt nur der erste Term im Nenner und es ergibt sich

$$\lim_{L\to\infty}\langle s_0 s_i\rangle = (\tanh\beta J)^i.$$

(c) *Bestimme die Korrelationslänge ξ definiert als*

$$C(i-j) \equiv e^{-|i-j|/\xi},$$

und zeige, dass sie am kritischen Punkt bei $T = T_c$ divergiert.

Lösung: Wir haben

$$\lim_{L\to\infty}\langle s_0 s_i\rangle = (\tanh\beta J)^i = e^{-i/\xi} = \left(e^{-1/\xi}\right)^i$$

und damit

$$\xi = -\frac{1}{\ln[\tanh\beta J]}.$$

Für das Isingmodell in einer Dimension gilt $T_c = 0$ bzw. $\beta \to \infty$ und deshalb

$$\lim_{\beta\to\infty}\xi = \infty.$$

(d) *Berechne die magnetische Suszeptibilität bei endlichem Volumen als Funktion der Temperatur, indem du die Korrelationsfunktion über alle Distanzen aufsummierst. Nehme danach wiederum den thermodynamischen Limes.*

Lösung: Wir berechnen (mit $t \equiv \tanh \beta J$)

$$\chi = \sum_{i=1}^{L} \langle s_0 s_i \rangle = \sum_{i=1}^{L} \frac{t^i + t^{L-i}}{1 + t^L} = \frac{(1 - t^L)(1 + t)}{(1 + t^L)(1 - t)} = \frac{1 - t^L}{1 + t^L} \exp\{2\beta J\} \,,$$

und finden im thermodynamischen Limes, dass

$$\lim_{L \to \infty} \chi = \exp\{2\beta J\} \,.$$

Damit ist klar, dass auch χ im Limes $T \to 0$ bzw. $\beta \to \infty$ divergiert.

R. Moser