

Kapitel 6

Klassische Spinmodelle

Man unterscheidet zwischen diskreten und kontinuierlichen Spinmodellen. Das reelle Skalarfeld auf dem Gitter ist ein *kontinuierliches Spinmodell*, da die Variablen auf den Gitterpunkten Werte im kontinuierlichen Targetraum $\mathcal{T} = \mathbb{R}$ annehmen. Als typisches Beispiel für ein *diskretes Spinmodell* mit diskretem Targetraum werden wir oft das *Ising-Modell* und seine Verallgemeinerungen bemühen. Hier ist der Targetraum \mathcal{T} sogar endlich. Das Ising-Modell dient als einfaches statistisches Modell für einen *Ferromagneten* mit „Elementarmagneten“ an den Punkten eines Kristallgitters, die sich entlang einer festen Achse ausrichten können. Von einem derart groben Modell sollte man keine genauen Resultate für realistische Spinsysteme erwarten. Es geht dabei eher um ein qualitatives Verständnis von Systemen mit sehr vielen und im Grenzfall unendlich vielen Freiheitsgraden. Von besonderem Interesse sind hierbei *Phasenübergänge* wie man sie bei Ferromagneten beobachtet: unterhalb der *Curie-Temperatur* T_c zeigt das Material eine spontane Magnetisierung, die oberhalb T_c verschwindet. Typische Vertreter der Ferromagneten sind Eisen, Kobalt und Nickel mit Curie-Temperaturen 1 043, 1 403 und 631 °K.

6.1 Isingartige Spinmodelle

Das Ising-Modell zählt zu den meistuntersuchten Modellen der statistischen Physik und man nennt es zurecht den harmonische Oszillator der statistischen Physik. Bei der Modellierung von Ferromagneten wird angenommen, daß die zu magnetischen Momenten führenden Spins der Gitteratome nur diskrete Zustände annehmen können. Der allgemeine Energieausdruck für eine solche Situation ist durch das *Heisenberg-Modell* gegeben,

$$H = - \sum_{x,y \in \Lambda} J_{xy} s_x s_y - h \sum_{x \in \Lambda} s_x. \quad (6.1)$$

Hierbei bezeichnet s_x den mehrkomponentigen Spin des Atoms am Platz x des Kristallgitters, h ist das Magnetfeld und J_{xy} die Wechselwirkungsstärke (die Austauschkopplung) zwischen den Spins an den Gitterplätzen x und y . Beim Ising-Modell berücksichtigt man nur die Spinkomponente in Richtung einer ausgezeichneten Achse, d.h. parallel oder antiparallel zu einer ausgezeichneten Achse. Oft wird zusätzlich angenommen, dass J_{xy} nur für benachbarte Spins ungleich Null ist und nicht vom betrachteten Paar abhängt,

$$H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y - h \sum_{x \in \Lambda} s_x, \quad s_x \in \{-1, 1\}. \quad (6.2)$$

Ist die Austauschkopplung positiv, so spricht man von einer ferromagnetischen Kopplung; ist sie negativ, so wird sie antiferromagnetisch genannt. Das Modell (6.2) wurde 1920 von E. ISINGS Doktorvater WILHELM LENZ bei der Untersuchung des Ferromagnetismus eingeführt [37].

Das *eindimensionale Modell*, auch *Isingkette* genannt, wurde von ISING gelöst [38]. Die thermodynamischen Potentiale der Isingkette können exakt berechnet werden. Es zeigt sich, dass in einer Dimension das Phänomen der spontanen Magnetisierung noch nicht auftritt.

Für das *zweidimensionale Modell* gelang es PEIERLS 1936 erstmalig einen Beweis für die Existenz einer Tieftemperaturphase mit spontaner Magnetisierung zu führen [45]. Es tritt ein Phasenübergang bei endlicher Temperatur auf und 1941 konnten KRAMERS und WANNIER die Phasenübergangstemperatur T_c ohne Magnetfeld exakt berechnen [46]. Drei Jahre später konstruierte LARS ONSAGER dann mit algebraischen Methoden die exakte Lösung [47]. Mit Hilfe der Transfermatrix fand er den expliziten Ausdruck für die Zustandssumme für verschwindendes äußeres Magnetfeld. CASIMIR, der aufgrund der Verwicklungen des Zweiten Weltkriegs von den aktuellen Entwicklungen der Physik der 40er Jahre abgeschnitten war, fragte PAULI, was denn in der Theorie geschehen sei. PAULI antwortete:

Nicht so viel Interessantes ... außer Onsagers Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells.

Dieser Kommentar soll verdeutlichen, welche Bedeutung Onsagers Lösung in der Theoretischen Physik zukommt. Schließlich sind Ising-artige Modelle die einzigen nicht-trivialen statistischen Modelle, die analytisch gelöst werden können und einen Phasenübergang aufweisen. Heute sind mehrere Lösungsmethoden für das 2–dimensionale Ising-Modell bekannt und einige werden wir in dieser Vorlesung besprechen. Seine große Bedeutung erlangt das Modell auch dadurch, dass Näherungsverfahren durch Vergleich mit der exakten Lösung getestet werden können.

In *drei Dimensionen* gibt es bis heute keine exakte Lösung des Ising-Modells. Man ist auf Approximationen, zum Beispiel die Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen oder

Simulationen angewiesen. In vier und mehr Dimensionen werden wichtige Eigenschaften des Modells exakt durch die Mean-field Näherung beschrieben.

Nun zur Definition der Spinmodelle: Die Gitterpunkte $x = (x^1, \dots, x^d)$ sind Elemente eines d -dimensionalen einfach kubischen Gitters Λ mit Gitterkonstante $a = 1$. Wir benutzen dieselbe Notation wie bei der Untersuchung von Skalarfeldern auf dem Gitter in Kapitel 5. Oft wählen wir periodische Randbedingungen, für die $(x^1, \dots, N_\mu, \dots, x^d)$ und $(x^1, \dots, 1, \dots, x^d)$ nächste Nachbarn sind. Dann wird das Gitter zu einem (diskretisierten) Torus. Man wählt zunächst eine endliche Anzahl Gitterpunkte $V = N_1 \cdots N_d$, obwohl am Ende der thermodynamische Grenzfall $V \rightarrow \infty$ steht. Für $a = 1$ hat die Einheitszelle das Volumen Eins und V ist das Gittervolumen. Jedem Gitterpunkt wird eine \mathcal{T} -wertige Variable s_x zugeordnet. Wegen den periodischen Randbedingungen gilt

$$s_{x'} = s_x \quad \text{für} \quad x' = x + N_\mu e_\mu, \quad \mu = 1, \dots, d. \quad (6.3)$$

Hier ist e_μ der Einheitsvektor in Richtung μ . Jeder Punkt im Innern des hyperkubischen Gitters hat $2d$ nächste Nachbarn und $2d$ Linien (links) zu diesen Nachbarn.

Eine *Konfiguration* $w = \{s_x | x \in \Lambda\}$ ist eine mögliche Belegung der s_x ,

$$w : \Lambda \longrightarrow \mathcal{T} \times \mathcal{T} \times \cdots \times \mathcal{T} = \mathcal{T}^V. \quad (6.4)$$

Da jeder Spin $|\mathcal{T}|$ verschiedene Werte annehmen kann, gibt es für einen endlichen Targetraum $|\mathcal{T}|^V$ verschiedene Konfigurationen.

6.2 Beispiele von Spinsystemen

Hier stellen wir die bekanntesten Spinmodelle vor.

(1) *Ising-Modelle*: Wir beginnen mit dem bekannten und oben bereits vorgestellten Ising-Modell mit Targetraum $\mathbb{Z}_2 = \{-1, 1\}$ und entsprechend 2^V verschiedenen Konfigurationen. Die Energie einer Konfiguration ist gleich

$$H_\Lambda^{\text{Ising}}(w) = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y - h \sum_x s_x \quad \text{mit} \quad s_x \in \{-1, 1\}. \quad (6.5)$$

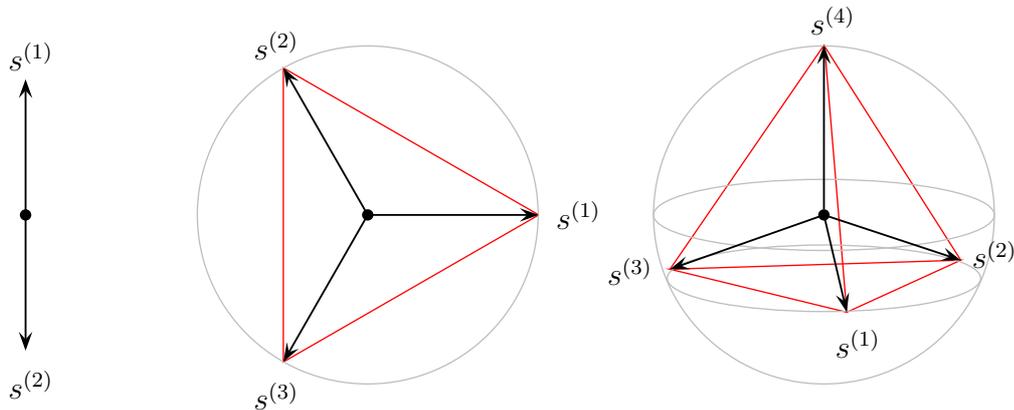
Dabei bezeichnet $\langle xy \rangle$ ein Paar von nächsten Nachbarn der Gitterpunkte. J ist die Kopplungsstärke zwischen benachbarten Spins und h ein äußeres Magnetfeld. Oft werden wir den Spezialfall $h = 0$ betrachten. Dann wird für $J > 0$ die Energie minimal wenn alle Spins den gleiche Wert annehmen und dies ist die Eigenschaft eines *Ferromagneten*.

(2) *Potts-Modelle*: POTTS fand seine verallgemeinerten Ising-Modelle nach einem entsprechenden Vorschlag von DOMB [39]. In seiner Arbeit untersuchte er die sogenannten

\mathbb{Z}_N -Modelle und die nach ihm benannten Modelle. Für beide Familien wird jedem Gitterpunkt eine q -wertige Variable σ_x zugeordnet und entsprechend gibt es q^V Konfigurationen. Im Potts-Modell ist die Energie einer festen Konfiguration gleich

$$H_\Lambda^{\text{Potts}}(w) = -J \sum_{\langle x,y \rangle} \delta(\sigma_x, \sigma_y) - h \sum_x \delta(\sigma_x, 1), \quad \sigma_x \in \{1, 2, \dots, q\}, \quad (6.6)$$

wobei $\delta(\sigma_x, \sigma_y)$ das Kroneckersymbol ist. Das Modell mit $q = 2$ ist identisch zum Ising-Modell. Allgemeiner kann der Hamiltonian (6.6) in die Form (6.5) für q Vektoren in \mathbb{R}^{q-1} gebracht werden. Als Targetraum wählen wir die Menge der Vektoren $\{s^{(1)}, \dots, s^{(q)}\}$ die vom Ursprung in Richtung von q auf der Einheitssphäre in \mathbb{R}^{q-1} gleichmäßig verteilte Punkte zeigen. Diese Punkte sind die Vertizes eines q -Simplex oder eines regulären q -Eder (q -hedron). Die Spezialfälle $q = 2, 3, 4$ sind in der Abbildung zu sehen.



Diese Vektoren haben die Skalarprodukte

$$s^{(\sigma)} \cdot s^{(\sigma')} = \begin{cases} 1 & \text{für } \sigma = \sigma' \\ -\frac{1}{q-1} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (6.7)$$

Die Existenz dieser Vektoren kann mit Hilfe der Induktion nachgewiesen werden. Ordnen wir der Variablen σ_x am Gitterplatz x den Vektor $s^{(\sigma_x)} = s_x$ zu, dann gilt

$$s_x \cdot s_y = \tilde{q} \delta(\sigma_x, \sigma_y) - \frac{1}{q-1} \quad \text{mit} \quad \tilde{q} = \frac{q}{q-1}. \quad (6.8)$$

Eingesetzt in (6.6) findet man für die Energiefunktion

$$H_\Lambda^{\text{Potts}}(w) = -\tilde{J} \sum_{xy} s_x \cdot s_y - \tilde{h} s^{(1)} \cdot \sum_x s_x - C \quad \text{mit} \quad J = \tilde{q}\tilde{J}, \quad h = \tilde{q}\tilde{h}, \quad (6.9)$$

und einer irrelevanten additiven Konstante

$$C = \tilde{J} \cdot (\text{Anzahl nächste Nachbarn}) + \tilde{h} \cdot (\text{Anzahl Gitterpunkte}).$$

Insbesondere ist das $q = 2$ das Potts-Modell gleich dem Ising-Modell. Das Modell mit $q = 1$ steht mit dem Bond-Perkolationsmodell in enger Beziehung.

(3) *O(n)-Modelle*: Diese haben den kontinuierlichen und kompakten Targetraum $S^{n-1} \subset \mathbb{R}^n$ und die Energiefunktion ist

$$H_{\Lambda}^{O(n)}(w) = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x \cdot s_y \quad \text{mit} \quad s_x \in \mathbb{R}^n, \quad s_x \cdot s_x = 1, \quad (6.10)$$

wobei der Punkt das gewöhnliche Skalarprodukt im \mathbb{R}^n ist und die Kopplung J positiv sein soll. Ist R eine Rotation im \mathbb{R}^n , dann gilt

$$Rs_x \cdot Rs_y = s_x \cdot s_y$$

und deshalb ist die Energie invariant unter globalen Drehungen der Spinvariablen,

$$H_{\Lambda}(Rw) = H_{\Lambda}(w), \quad Rw = \{Rs_x \mid x \in \Lambda\} \quad (6.11)$$

Dieser $O(n)$ -Invarianz verdankt das Modell seinen Namen. Für $n = 2$ heißt das Modell auch *Rotor-Modell* und für $n = 3$ *klassisches Heisenberg-Modell*.

(4) *Gaußsches Modell*: Wir notieren, dass für $h = 0$ die Energiefunktionen der betrachteten Modelle bis auf eine additive Konstante die allgemeine Form

$$H_{\Lambda}(w) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{xy} (s_x - s_y)^2 \quad (6.12)$$

mit passenden Kopplungskonstanten J_{xy} haben. Diese Aussage ist richtig, weil die Spinvariablen s_x eine feste Länge haben. Dies legt nahe, die allgemeinere Klasse von Modellen mit $s_x \in \mathbb{R}$ und Energiefunktion

$$H_{\Lambda}(w) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{xy} (s_x - s_y)^2 \quad (6.13)$$

zu untersuchen. Für spezielle Kopplungen J_{xy} geht sie über in den kinetischen Term für das freie Skalarfeld auf dem Gitter. Dabei wird der kontinuierliche Spin s_x mit dem Wert ϕ_x des Gitterfeldes am Punkt x identifiziert.

(5) *Wechselwirkende kontinuierliche Spins*: Läßt man noch eine Selbstwechselwirkung der

Spinvariablen $s_x \in \mathbb{R}$ zu, dann hat die Energiefunktion die Form

$$H_\Lambda(w) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{xy} (s_x - s_y)^2 + \sum_x V(s_x). \quad (6.14)$$

Für spezielle Kopplungen J_{xy} ist diese Energiefunktion für die kontinuierlichen Spins gleich der euklidischen Wirkung für das wechselwirkende Skalarfeld. Analog kann die Energiefunktion (6.10) des $O(N)$ -Modells als euklidischen Wirkung für das Sigma-Modell auf dem Gitter,

$$S_\Lambda^{\text{Sigma}}(w) = \frac{1}{2g^2} \sum_{\langle xy \rangle} (\phi_x - \phi_y)^2, \quad \phi_x \in \mathbb{R}^n, \quad \phi_x \cdot \phi_x = 1 \quad (6.15)$$

identifiziert werden.

Die Identifikation von Spinkonfigurationen als Gitterfelder einer diskretisierten euklidischen Feldtheorie und von Energiefunktionen als euklidische Wirkungen,

$$\begin{aligned} w = \{s_x | x \in \Lambda\} &\longleftrightarrow w = \{\phi_x | x \in \Lambda\} \\ \beta H(w) &\longleftrightarrow S_E(w)/\hbar \end{aligned} \quad (6.16)$$

war und ist sehr fruchtbar für den Fortschritt der Quantenfeldtheorie als auch der statistische Physik. Insbesondere erlaubt sie uns die mächtigen Methoden der statistischen Physik auf Probleme der Quantenfeldtheorien bei Temperatur Null oder bei endlichen Temperaturen anzuwenden.

6.3 Spinsysteme im Gleichgewicht

In der statistischen Physik sehen wir von einer exakten Beschreibung der Systemdynamik ab. Man braucht nicht alle mikroskopischen Freiheitsgrade zu kennen um makroskopische Variablen wie etwa Druck oder Magnetisierung zu bestimmen. Wir beschreiben das System durch eine sogenannten *Dichtematrix*, die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit eine Konfiguration auftritt. Im hier interessierenden *kanonischen Ensemble* bestimmt die Energie $H(w)$ einer Konfiguration w deren Wahrscheinlichkeit. Für allgemeinere Spinsysteme wird die Energiefunktion von mehreren Parametern $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ abhängen. Diese können zum Beispiel Kopplungen zwischen den Spins oder der Spins an äussere Felder beschreiben. Im kanonischen Ensemble tritt eine Konfiguration w mit dem Boltzmannfaktor

$$\exp(-\beta H_\Lambda(w)), \quad \beta = \frac{1}{k_b T} \quad (6.17)$$

als Gewicht auf. T bezeichnet die absolute Temperatur und k_b die Boltzmannkonstante. Die Zustandssumme ist durch

$$Z_\Lambda(\beta, \lambda) = \sum_w \exp(-\beta H_\Lambda(w)) \quad (6.18)$$

gegeben. Für diskrete Systeme erstreckt sich die Summe über alle Konfigurationen der V Spins. Für kontinuierliche Systeme wird die Summe zu einem Integral über alle Gittervariablen. Zum Beispiel für das Gaußsche Modell

$$Z_\Lambda(\beta) = \int \mathcal{D}w e^{-\beta H(w)}, \quad H(w) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{xy} (s_x - s_y)^2, \quad (6.19)$$

mit dem apriori Lebesgue Maß auf \mathbb{R}^V ,

$$\mathcal{D}w = \prod_{x \in \Lambda} ds_x, \quad s_x \in \mathbb{R}. \quad (6.20)$$

Die Zustandssummen der $O(n)$ -Modelle hat eine ähnliche Form wie (6.19),

$$Z_\Lambda(\beta, J) = \int d\mu(w) e^{-\beta H(w)}, \quad H(w) = -J \sum_{x,y} s_x \cdot s_y, \quad (6.21)$$

allerdings mit dem von \mathbb{R}^n auf die Sphäre S^{n-1} induzierten apriori Maß,

$$d\mu(w) = \prod_{x \in \Lambda} d\mu(s_x), \quad d\mu(s) = \delta(s^2 - 1) ds, \quad s_x \in \mathbb{R}^n. \quad (6.22)$$

Im Allgemeinen hängt die Zustandssumme von der inversen Temperatur β , den Parametern λ in der Energiefunktion und dem Gitter Λ ab.

Für ein diskretes Spinmodell ist der Erwartungswert einer Observablen $A(w)$ im kanonischen Ensemble gegeben durch

$$\langle A \rangle_\Lambda(\beta, \lambda) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta, \lambda)} \sum_w A(w) e^{-\beta H_\Lambda(w)}, \quad (6.23)$$

und für ein kontinuierliches Modell durch

$$\langle A \rangle_\Lambda(\beta, \lambda) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta, \lambda)} \int d\mu(w) A(w) e^{-\beta H_\Lambda(w)}. \quad (6.24)$$

Im Folgenden werden wir nur noch die Abhängigkeit von den jeweils relevanten Systemparametern andeuten, zum Beispiel von der inversen Temperatur β und dem Gitter Λ .

Wir werden die Notation für diskrete Spinmodelle benutzen. Die entsprechenden Formeln für kontinuierlichen Modelle erhält man nach der Ersetzung $\sum_w \rightarrow \int d\mu(w)$.

Die wichtigsten Größen der Thermodynamik lassen sich aus der Zustandssumme ableiten. Zum Beispiel ist die *Helmholtzsche freie Energie* proportional zum Logarithmus der Zustandssumme,

$$F_\Lambda(\beta) = -\frac{1}{\beta} \log Z_\Lambda(\beta). \quad (6.25)$$

Im thermodynamischen Grenzfall $V \rightarrow \infty$ divergiert diese extensive Größe und man benutzt statt ihrer die *freie Energiedichte*

$$f_\Lambda(\beta) = \frac{1}{V} F_\Lambda(\beta). \quad (6.26)$$

Für kurzreichweitige Wechselwirkungen wie im Ising-Modell wird im thermodynamischen Grenzfall $V \rightarrow \infty$ die freie Energiedichte gegen die freie Energiedichte im unendlichen Volumen konvergieren,

$$f_\Lambda(\beta) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} f(\beta). \quad (6.27)$$

Die Energie einer einzelnen Konfigurationen ist dem Experimentator nicht zugänglich. Gemessen wird der Erwartungswert der Energie im Gleichgewichtszustand, die sogenannte *innere Energie*

$$\begin{aligned} U_\Lambda(\beta) &= \langle H \rangle_\Lambda(\beta) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} \sum_w H_\Lambda e^{-\beta H_\Lambda(w)} \\ &= -\frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_w e^{-\beta H_\Lambda(w)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_\Lambda(\beta). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Ersetzen wir den Logarithmus der Zustandssumme durch die freie Energie, dann folgt

$$U_\Lambda(\beta, h) = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_\Lambda(\beta, h)) = F_\Lambda(\beta, h) - T \frac{\partial}{\partial T} F_\Lambda(\beta, h). \quad (6.29)$$

Die Magnetisierung einzelner Spinkonfigurationen ist uninteressant, im Gegensatz zur mittleren *makroskopischen Magnetisierung*. Sie entspricht der 1-Punktfunktion

$$m := \langle M \rangle = \langle s_x \rangle = -\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial h} F_\Lambda(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial h} f_\Lambda(\beta, h), \quad M = \frac{1}{V} \sum_x s_x. \quad (6.30)$$

Die zweite Gleichung gilt wegen der Translationsinvarianz auf dem Gitter mit periodischen Randbedingungen.

Genauere Informationen über das System erhält man aus den n -Punkt Korrelationsfunktionen

$$G^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \langle s_{x_1} \cdots s_{x_n} \rangle, \quad x_1, \dots, x_n \in \Lambda. \quad (6.31)$$

Speziell die Zweipunktfunktion

$$G^{(2)}(x, y) \equiv G(x, y) = \langle s_x s_y \rangle \quad (6.32)$$

beschreibt die Korrelation zwischen zwei möglicherweise weit voneinander entfernten Spins. Ist sie zum Beispiel positiv, so gibt es eine Tendenz für diese Spins parallel zu stehen. Gilt dies für beliebig weit entfernte Spins, so liegt *spontane Magnetisierung* vor. Kennt man alle Korrelationsfunktionen, dann kann man im Prinzip den Gibbs-Zustand rekonstruieren.

An dieser Stelle ist ein interessanter Unterschied zwischen klassischen Spinmodellen und diskretisierten euklidischen Quantenfeldtheorien bemerkenswert. Bei den Spinmodellen rührt die Temperaturabhängigkeit vom temperaturabhängigen Boltzmannfaktor des Wahrscheinlichkeitsmaßes

$$dP_\beta(w) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} e^{-\beta H(w)} d\mu(w) \quad (6.33)$$

mit dem die Erwartungswerte im thermischen Gleichgewicht berechnet werden. In einer euklidischen Gitterfeldtheorie mit Wahrscheinlichkeitsmaß

$$dP_\beta(w) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} e^{-S(w)} d\mu(w) \quad (6.34)$$

kommt die Temperaturabhängigkeit von der Geometrie des zugrundeliegenden Gitters. Bei Temperatur T hat das Gitter in die euklidische Zeitrichtung die Länge β und das Gitterfeld ist periodisch mit Periode β .

6.4 Variationsprinzipien

In diesem Abschnitt studieren wir die auf Variationsprinzipien beruhenden Definitionen der Zustandssumme und der effektiven Wirkung. Wir benutzen die Notation für kontinuierlichen Spinmodelle um den Zusammenhang zu den Gitterfeldtheorien zu unterstreichen. Näheres findet man auch im Buch von Roepstorff [17]. Es sei P ein Wahrscheinlichkeitsmaß mit Dichte $p \geq 0$ auf dem Konfigurationsraum,

$$dP(w) = p(w) d\mu(w) \quad \text{mit} \quad \int dP(w) = 1. \quad (6.35)$$

Die *Boltzmann-Gibbs-Shannon Entropie* ist definiert als

$$S_B(P) = - \int d\mu(w) p(w) \log p(w). \quad (6.36)$$

Die freie Energie hat nun folgende variationelle Charakterisierung,

$$\beta F = \inf_P \left(\beta \int dP(w) H(w) - S_B(P) \right). \quad (6.37)$$

Das Infimum ist bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse zu nehmen. Die Nebenbedingung in (6.35) erzwingen wir mit Hilfe der Addition von $\lambda(\int dP(w) - 1)$ mit Lagrange Multiplikator λ . Das Extremum des Ausdrucks in Klammern unter Variationen von $p(w)$ führt dann auf

$$0 = \int d\mu(w) \delta p(w) (\beta H(w) + \log p(w) + 1 + \lambda) \Rightarrow p(w) = \text{const} \cdot e^{-\beta H(w)}.$$

Das eindeutige Infimum bezüglich aller *Wahrscheinlichkeitsmasse* ist also das Gibbs-Maß

$$dP_\beta(w) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(w)} d\mu(w) \quad \text{mit} \quad Z = \int d\mu(w) e^{-\beta H(w)}. \quad (6.38)$$

Eingesetzt in (6.37) ergibt sich der bekannte Ausdruck für die freie Energie,

$$F = -\frac{1}{\beta} \log Z. \quad (6.39)$$

Das thermodynamische Äquivalent zur *effektiven Wirkung* in der Feldtheorie ist das freie Energiefunktional bei Vorgabe eines im Allgemeinen inhomogenen mittleren Spinfeldes m_x . Dieses Funktional kann ebenfalls über ein Variationsprinzip definiert werden,

$$\beta F[m] = \inf_P \left(\beta \int dP(w) H(w) - S_B(P) \mid \int dP(w) s_x = m_x \right). \quad (6.40)$$

Hier wird bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse P bei vorgegebenen mittleren Spinfeld minimiert. Das resultierende $F[m]$ ist konvex, da die Menge der Wahrscheinlichkeitsmasse konvex ist. Wir werden nun zeigen, daß F die Legendre-Transformierte des Schwinger-Funktional ist. Dazu erzwingen wir die Nebenbedingung in (6.40) mit Hilfe eines Lagrange-Multiplikatorfeldes j_x . Zuerst minimiert man

$$\beta F[m] = \inf_P \left(\int dP(w) \{ \beta H(w) - (j, s - m) \} - S_B(P) \right),$$

wobei $(j, s) = \sum_x j_x s_x$ das ℓ_2 -Skalarprodukt ist, bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse. Das minimierende Maß ist

$$dP_j(w) = \frac{1}{Z[j]} e^{-\beta H(w) + (j, s)} d\mu(w) \quad \text{mit} \quad Z[j] = \int d\mu(w) e^{-\beta H(w) + (j, s)} \quad (6.41)$$

Eingesetzt in (6.40) findet man folgende einfache Formel für $F[m]$,

$$\beta F[m] = (j, m) - W[j] \quad \text{mit} \quad W[j] = \log Z[j]. \quad (6.42)$$

Darin ist die Quelle j so zu wählen, dass die Nebenbedingung (6.40) an das mittlere Feld m_x erfüllt ist,

$$m_x = \int dP_j(w) s_x = \frac{\delta W[j]}{\delta j_x}. \quad (6.43)$$

Das Resultat (6.42,6.43) bedeutet, dass $F[m]$ die Legendre Transformierte der Schwingerfunktion ist,

$$\beta F[m] = \sup_j ((j, m) - W[j]) = (\mathcal{L}W)[m]. \quad (6.44)$$

Ist man nur an der mittleren Magnetisierung und nicht an allgemeinen Korrelationsfunktionen der Spins interessiert, dann genügt es das freie Energiefunktional $F[m]$ für ein konstantes mittleres Spinfeld $m_x = m$ zu bestimmen. Für ein translationsinvariantes System ist der Mittelwert von $\langle s_x \rangle$ gleich dem Mittelwert von $M = \sum_x s_x / V$ und entsprechend löst die freie Energiedichte $f(m)$ das Variationsprinzip

$$\beta f(m) = \frac{1}{V} \inf_P \left(\beta \int dP(w) H(w) - S_B(P) \mid \int dP(w) M = m \right). \quad (6.45)$$

Ähnlich wie bei der effektiven Wirkung beweist man, dass

$$\beta f(m) = (\mathcal{L}w)(m) \quad \text{mit} \quad w(j) = \frac{1}{V} \log \int d\mu(w) e^{-\beta H(w) + j \sum s_x}. \quad (6.46)$$

Der Übergang von den Spinmodellen bei endlichen Temperaturen zu Gitterfeldtheorien geschieht durch die Ersetzungen

$$\beta H \longrightarrow S/\hbar, \quad \beta F[m] \longrightarrow \Gamma[\varphi]/\hbar, \quad \beta f(m) \longrightarrow u(\varphi)/\hbar. \quad (6.47)$$

Insbesondere hat die effektive Wirkung des quantisierten Skalarfeldes folgende variationelle Charakterisierung,

$$\Gamma[\varphi] = \inf_P \left(\int dP(w) S(w) - \hbar S_B(P) \mid \int dP(w) \phi_x = \varphi_x \right). \quad (6.48)$$

Das konvexe Γ ist die Legendre-Transformierte des Schwingerfunktionals,

$$\Gamma[\varphi] = (\mathcal{L}W)[\varphi] \quad \text{mit} \quad W[j] = \log \int \mathcal{D}w e^{-S(w)/\hbar + (j, \phi)}. \quad (6.49)$$

Entsprechend findet man für das oben eingeführte effektive Potential

$$u(\varphi) = (\mathcal{L}w)(\varphi) \quad \text{mit} \quad w(j) = \frac{1}{\beta V} \log \int d\mu(w) e^{-S(w) + j \sum \phi_x}. \quad (6.50)$$

Im klassischen Grenzfall geht die effektive Wirkung Γ in die klassische Wirkung über. Die variationelle Charakterisierung der effektive Wirkung oder des effektiven Potentials ist ein Ausgangspunkt für die nützliche Mean-Field Näherung. Diese wird im nächsten Kapitel besprochen.

6.5 Aufgaben

Aufgabe 11: 2-dimensionales Ising Modell, Teil I

Bestimmen Sie mittels Summation über alle Konfigurationen die innere Energiedichte und die Magnetisierung für ein 2×2 , 3×3 und 4×4 Gitter mit periodischen Randbedingungen für $\beta = 0.0$ bis 1.0 in Schritten von 0.05 . Das äußere Feld sei Null ($h = 0$). Stellen Sie das Resultat in einem Plot dar.

Setzen sie J in

$$H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y$$

gleich 1. Berechnen Sie sowohl $\langle m \rangle$ als auch $\langle |m| \rangle$. Kann man auch ohne Rechnung sagen, welchen Wert $\langle m \rangle$ annimmt?

Aufgabe 12: 2-dimensionales Ising Modell, Teil II

Verwenden Sie das gegebene Programm (siehe Homepage) zur Simulation des 2D Isingmodells bei $\beta = 0.4406868$ und $h = 0$ mit dem Metropolisalgorithmus. Simulieren Sie für Gittergrößen 4×4 , 8×8 und 32×32 . Führen Sie dazu jeweils 200000 sweeps über das

Gitter aus. Bestimmen Sie

$$u = \frac{1}{V} \langle H \rangle, \quad \langle |m| \rangle \quad \text{und} \quad \langle m^2 \rangle$$

Vergleichen Sie das Resultat für das 4×4 Gitter mit dem Resultat der analytischen Rechnung.