

# Kapitel 7

## Molekularfeldnäherung

Nur wenige statistisch-mechanische Modelle können explizit gelöst werden und deshalb ist man an effizienten Näherungsmethoden interessiert. Eine solche liefert die Molekularfeldnäherung. Diese Näherung ist relativ einfach und universell einsetzbar. Sie firmiert auch unter anderen Namen: *mean field Näherung*, *Curie-Weiss-Näherung* (für Ferromagnete) oder *Bragg-Williams-Näherung* (für Gittergase). Molekularfeldnäherungen sind relativ leicht zu bekommen und geben schon qualitativ richtige Resultate. Wir besprechen hier die Molekularfeldnäherung für Spinmodelle und Euklidische Gitterfeldtheorien in beliebigen Dimensionen.

### 7.1 MFA für Spinmodelle

In der mean-field Approximation (MFA) lässt man im Variationsprinzip (6.40) nur Produktmasse zu,

$$dP(w) = \prod_x d\nu_x(s_x), \quad d\nu_x(s) = d\mu(s)p_x(s). \quad (7.1)$$

Dabei ist  $\nu_x(s)$  ein Wahrscheinlichkeitsmass auf dem Targetraum des Spinmodells und  $\mu$  das  $x$ -unabhängige apriori-Maß. Da man in der Molekularfeldnäherung nur bezüglich einer Teilmenge von Wahrscheinlichkeiten minimiert, beschränkt das freie Energiefunktional in dieser Näherung  $F_{\text{MF}}[m]$  das exakte Funktional  $F[m]$  von oben,

$$F_{\text{MF}}[m] \geq F[m]. \quad (7.2)$$

Im Gegensatz zur Menge aller Wahrscheinlichkeitsmasse ist die Teilmenge der Produktmasse nicht konvex und deshalb braucht  $F_{\text{MF}}$  nicht konvex zu sein. Zur Berechnung von

$F_{\text{MF}}$  notieren wir

$$dP(w) \log p(w) = - \prod_x d\nu_x(s_x) \sum_y \log p_y(s_y),$$

so dass aufgrund von  $\int d\nu_x(s) = 1$  die Entropie des Gesamtsystems die Summe der Entropien auf den Gitterpunkten wird,

$$S_B(P) = \sum_x s_B(p_x) \quad \text{mit} \quad s_B(p_x) = - \int d\nu_x(s) \log p_x(s). \quad (7.3)$$

Die Zwangsbedingung in (6.40) faktorisiert,

$$\int d\nu_x(s) s = m_x. \quad (7.4)$$

Wir untersuchen hier allgemeine Spinsysteme mit Energiefunktionen

$$H(w) = - \sum_{x \neq y} J_{xy} s_x s_y - h \sum_x s_x + \sum_x A(s_x), \quad s_x \in \mathcal{T}. \quad (7.5)$$

Wegen der Nebenbedingung (7.4) gilt für Produktmaße

$$\int dP(w) H(w) = - \sum_{x \neq y} J_{xy} m_x m_y - h \sum_x m_x + \sum_x \int d\nu_x(s) A(s), \quad (7.6)$$

Damit lautet die Molekularfeldnäherung für das freie Energiefunktional

$$\begin{aligned} F_{\text{MF}}[m] &= - \sum_{\langle xy \rangle} J_{xy} m_x m_y - h \sum_x m_x + \sum_x \alpha_{\text{MF}}(m_x), \quad \text{mit} \\ \beta \alpha_{\text{MF}}(m) &= \inf_p \left\{ \int d\nu(s) \{ \beta A(s) + \log p(s) \} \mid \int d\nu(s) s = m \right\}. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Für die minimierende Wahrscheinlichkeitsdichte findet man mit der Multipliemethode

$$p_j(s) = \frac{1}{z_0(j)} e^{-\beta A(s) + js} \quad \text{mit} \quad z_0(j) = \int d\mu(s) e^{-\beta A(s) + js}, \quad (7.8)$$

wobei  $j$  aus der Selbstkonsistenzgleichung (Gapgleichung) zu berechnen ist

$$m = \frac{1}{z_0(j)} \int_{\mathcal{T}} d\mu(s) e^{-\beta A(s) + js} s = \frac{dw_0}{dj}, \quad w_0(j) = \log z_0(j). \quad (7.9)$$

Für das minimierende Mass  $d\nu(\phi)$  in (7.8) vereinfacht sich  $\alpha_{\text{MF}}$  zu

$$\beta\alpha_{\text{MF}}(m) = jm - w_0(j) = (\mathcal{L}w_0)(m). \quad (7.10)$$

Für ein homogenes mittleres Spinfeld ist  $F_{\text{MF}}[m] = Vf_{\text{MF}}(m)$  mit freien Energiedichte

$$f_{\text{MF}}(m) = -\frac{\tilde{J}m^2}{2} - hm + \alpha_{\text{MF}}(m) \quad \text{mit} \quad \tilde{J} = \frac{2}{V} \sum_{x,y} J_{xy}. \quad (7.11)$$

Ist wie beim Isingmodell  $J_{xy} = J$  für nächste Nachbarn  $x$  und  $y$  und sonst gleich Null, dann ist die effektive Kopplung  $\tilde{J}$  für ein hyperkubisches Gitter

$$\tilde{J} = 2dJ. \quad (7.12)$$

Nur über diese Relation geht die Dimension des Gitters in die Molekularfeldapproximation ein. Für nicht-hyperkubische Gitter lautet die Beziehung  $\tilde{J} = qJ$ , wobei  $q$  die Anzahl nächster Nachbarn eines Gitterpunktes ist.

### 7.1.1 MFA für das Isingmodell

Wir können die allgemeinen Resultate sofort auf das Isingmodell übertragen, wenn wir den Isingspin als reellwertig ansehen,  $\mathcal{T} = \mathbb{R}$ , und die Einschränkung auf die Werte  $\pm 1$  mit Hilfe des apriori Punktmaßes erzwingen,

$$d\mu(w) = \prod_x d\mu(s_x), \quad d\mu(s) = \delta(s-1) + \delta(s+1). \quad (7.13)$$

Für das Isingmodell verschwindet  $A$  in (7.8) und

$$z_0(j) = 2 \cosh j. \quad (7.14)$$

Es genügt hier das freie Energiefunktional für ein konstantes mittleres Feld zu untersuchen und zur freien Energiedichte überzugehen,

$$f_{\text{MF}} = -dJm^2 - hm + T(\mathcal{L}w_0)(m). \quad (7.15)$$

Man beachte, daß im Gegensatz zur mikroskopischen Spinvariablen  $s_x$  das gemittelte Spinfeld  $m$  kontinuierlich ist,  $m \in [-1, 1]$ .

Wir benötigen noch die Legendre-Transformierte von  $w_0 = \log(2 \cosh j)$ . Dazu lösen wir  $m = \tanh j$  nach  $j$  auf, und benutzen das Resultat  $j(m) = \arctan m$  in

$$(\mathcal{L}w_0)(m) = jm - \log(2 \cosh j). \quad (7.16)$$

Eingesetzt in (7.15) finden wir für die freie Energiedichte bei homogenen mittleren Feld in der Molekularnäherung den einfachen Ausdruck

$$f_{\text{MF}}(m) = -\frac{\tilde{J}m^2}{2} - hm + \frac{1+m}{2\beta} \log \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2\beta} \log \frac{1-m}{2}. \quad (7.17)$$

**Eine alternative Herleitung von  $f_{\text{MF}}$ :** Bei der alternativen Ableitung der Molekularfeldnäherung ersetzt man in der Energie die Wechselwirkung eines Spins mit seinen nächsten Nachbarn durch eine mittlere Wechselwirkung mit allen Spins,

$$J_{xy} \longrightarrow \frac{1}{V} \sum_y J_{xy} = \frac{\tilde{J}}{V}. \quad (7.18)$$

Wegen der Translationsinvarianz auf dem Gitter hängt  $\tilde{J}$  nicht vom Punkt  $x$  ab. In dieser Näherung vereinfacht sich der Ausdruck für die Energie wie folgt,

$$H \longrightarrow H_{\text{MFA}} = -V \left\{ \frac{1}{2} \tilde{J} m^2(s) + hm(s) \right\}, \quad m(s) = \frac{1}{V} \sum s_x. \quad (7.19)$$

Für das Isingmodell sind die Werte für das mittlere Feld  $m(s)$  aus der Menge

$$M \in \left\{ -1, -1 + \delta, -1 + 2\delta, \dots, 1 - \delta, 1 \right\}, \quad \delta = \frac{2}{V}.$$

Für ein mittleres Feld  $m \in M$  zeigen  $\frac{1}{2}V(1+m)$  Spins nach 'oben' und  $\frac{1}{2}V(1-m)$  Spins nach 'unten'. Also gibt es zu jedem Wert von  $m \in M$  genau

$$d(m) = \frac{V!}{\left[\frac{1}{2}V(1+m)\right]! \left[\frac{1}{2}V(1-m)\right]!} \quad (7.20)$$

Spinkonfigurationen  $w = \{s\}$ . Nach der Stirlingschen Formel ist

$$\log(n!) = n(\log n - 1) + o(n),$$

und wir finden für die Zustandssumme die Näherungsformel

$$Z_{\text{MF}} = \sum_{m \in M} d(m) e^{-\beta H_{\text{MF}}(m)} = \sum_m e^{-V\beta f_{\text{MF}}(m)} \quad (7.21)$$

mit der freien Energiedichte (7.17), bis auf Korrekturterme der Ordnung  $o(V)/V$ . Im thermodynamischen Grenzfall verschwinden diese diese Korrekturterme  $m$  wird zu einem kontinuierlichen Feld mit Werten im Intervall  $[-1, 1]$ . Diese zweite Ableitung der MFA

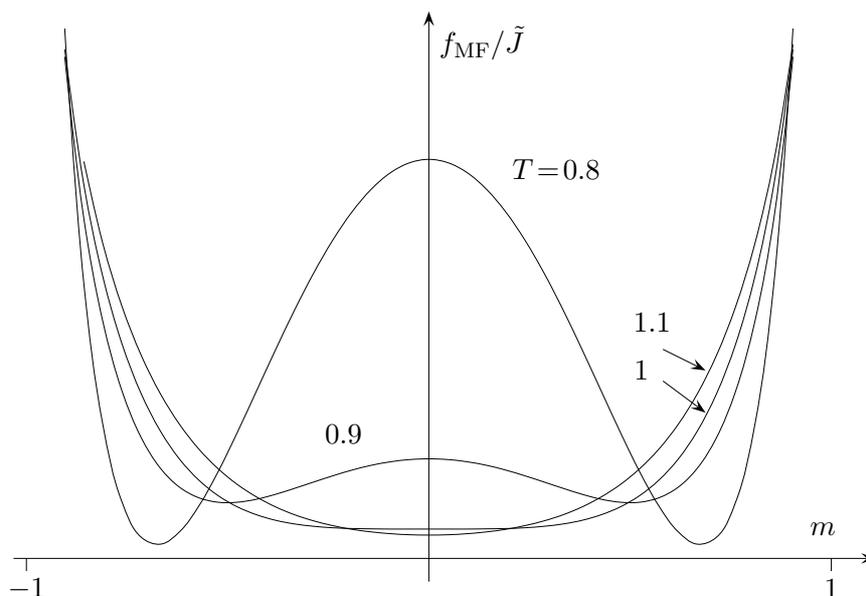
macht deutlich, dass

$$P_{\text{MF}}(m) = \frac{1}{Z_{\text{MF}}} e^{-\beta V f_{\text{MF}}(m)} \quad (7.22)$$

die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auffinden des mittleren Feldes  $m$  in der Molekularfeldnäherung ist. Für große Volumes zeigt diese Verteilung ausgeprägte Maxima bei den Minimas der freien Energiedichte.

In der folgenden Abbildung ist  $f_{\text{MF}}/\tilde{J}$  für verschwindendes Magnetfeld und verschiedene Temperaturen geplottet. Für  $T < T_c = \tilde{J}$  hat  $f_{\text{MF}}$  ein Maximum am Ursprung und zwei Minima bei  $\pm m_0$ , für  $T > T_c$  ein globales Minimum am Ursprung. Die Werte des Potentials an den Endpunkten und am Ursprung sind

$$f_{\text{MF}}(h = 0, m = 0) = -T \log 2 \quad \text{und} \quad f_{\text{MF}}(h = 0, m = 1) = -dJ.$$



Die freie Energiedichte  $f_{\text{MF}}(m)$  in (7.17) ist minimal für die Lösung  $m_0$  der *Gapgleichung*

$$\tilde{J}m_0 + h = \frac{1}{2\beta} \log \frac{1 + m_0}{1 - m_0} \implies m_0 = \tanh(\beta\tilde{J}m_0 + \beta h). \quad (7.23)$$

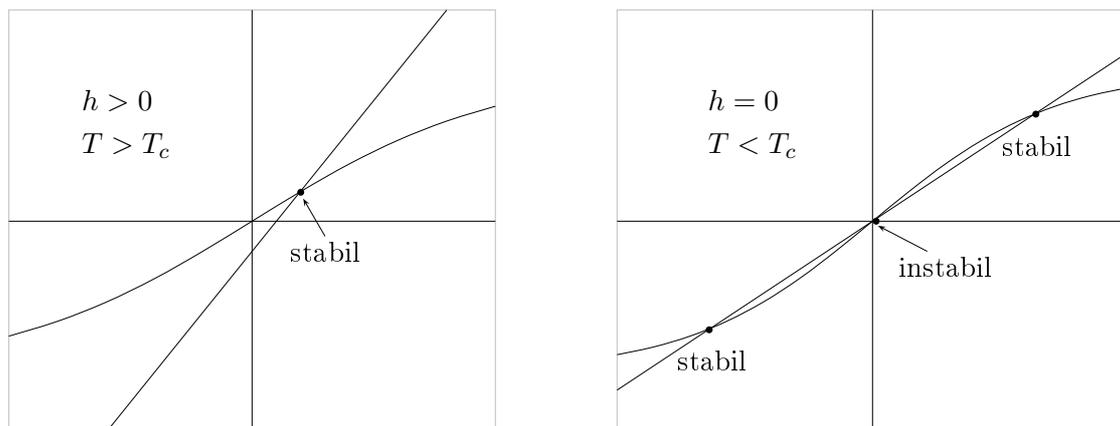
In dieser transzendenten *Selbstkonsistenzgleichung* für das mittlere Feld setzen wir  $x = \beta\tilde{J}m_0 + \beta h$ . Die Bestimmungsgleichung für  $x$  hat die Form

$$\frac{1}{\tilde{J}}(Tx - h) = \tanh x. \quad (7.24)$$

Sie besitzt eine eindeutige Lösung wenn die Steigung  $T/\tilde{J}$  der linearen Funktion auf der

linken Seite größer oder gleich der Steigung der tanh-Funktion auf der rechten Seite ist, also wenn gilt

$$T > T_c = \tilde{J} = 2dJ. \quad (7.25)$$



Oberhalb der kritischen Temperatur strebt die Lösung  $m_0(h)$  für  $h \rightarrow 0$  gegen Null und die Suszeptibilität

$$\chi = \left( \frac{\partial m_0}{\partial h} \right) \Big|_{h=0} \quad (7.26)$$

folgt mit (7.23) dem *Curie-Weisschen Gesetz*,

$$\chi \stackrel{m_0(0)=0}{=} \beta(\tilde{J}\chi + 1) \implies \chi = \frac{1}{T - T_c}. \quad (7.27)$$

Es ist Brauch, die dimensionslose Temperaturdifferenz einzuführen,

$$\epsilon = \frac{T_c - T}{T_c}. \quad (7.28)$$

Die Divergenz der Suszeptibilität in der Nähe des kritischen Punktes bei  $T_c$  (für  $T \downarrow T_c$  oder  $T \uparrow T_c$ ) ist

$$\chi \sim |\epsilon|^{-\gamma}. \quad (7.29)$$

In der Molekularfeldnäherung ist der *kritische Exponent*  $\gamma$  gleich 1.

Unterhalb der kritischen Temperatur und für  $h > 0$  ist  $m_0(h)$  die größte der drei Lösungen der Gapgleichung (7.23). Für  $h \downarrow 0$  ergibt sich eine spontane Magnetisierung

$m_0(T) > 0$ . In der Nähe der kritischen Temperatur strebt  $m_0$  gegen Null und wir können  $\tanh \beta \tilde{J} m$  in der Formel (7.23) mit  $h = 0$  in eine Potenzreihe entwickeln,

$$m_0 = \beta \tilde{J} m_0 - \frac{1}{3} (\beta \tilde{J} m_0)^3 + \dots$$

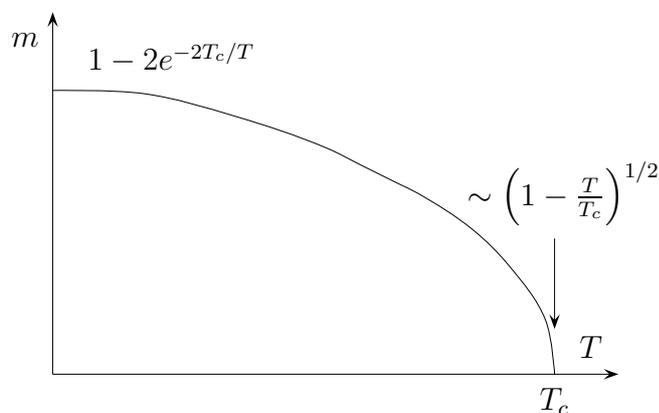
Diese Gleichung hat wie erwartet drei Lösungen,

$$m_0 = 0 \quad \text{und} \quad m_0 = \pm \left( \frac{1}{\beta \tilde{J}} \right)^{3/2} \sqrt{3} (\beta \tilde{J} - 1)^{1/2}. \quad (7.30)$$

Die erste Lösung gehört zum ungeordneten paramagnetischen Hochtemperaturzustand und die beiden anderen Lösungen zu den geordneten ferromagnetischen Tieftemperaturzuständen. Für  $T < T_c = \tilde{J}$  haben die geordneten Zustände minimale freie Energiedichte. Die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung ist in der folgenden Figure gezeigt. Sie verschwindet für  $T \uparrow T_c$  gemäß

$$m_0(T) = \sqrt{3} \frac{T}{T_c} \epsilon^{1/2}. \quad (7.31)$$

Die spontane Magnetisierung ist ein *Ordnungsparameter* für das System, da  $m_0 \neq 0$  bedeutet, daß das System geordnet ist und  $m_0 = 0$ , daß es ungeordnet ist.



Der Exponent für das asymptotische Potenzgesetz des Ordnungsparameters ist  $\beta$ , so daß im Allgemeinen

$$m_0(T) \sim \epsilon^\beta. \quad (7.32)$$

Die Vorhersage der MFA für den kritischen Exponenten<sup>1</sup>  $\beta$  ist  $\frac{1}{2}$ . In der Molekularfeldnäherung springt die *spezifische Wärme* bei  $T_c$  von einem endlichen Wert unterhalb  $T_c$  auf

<sup>1</sup>Nicht mit der inversen Temperatur verwechseln!

0 oberhalb  $T_c$ . Die Höhe des Sprungs ist  $3k/2$ .

Die Magnetisierung als Funktion des Magnetfeldes  $h$  folgt aus der Selbstkonsistenzgleichung (7.23) wenn wir die rechte Seite dieser Gleichung für  $T = T_c$  bis zur dritten Ordnung in  $h$  entwickeln,

$$m_0 = m_0 + \beta_c h - \frac{1}{3}(m_0 + \beta_c h)^3 + \dots \quad (7.33)$$

Für sehr kleine  $m_0$  und  $h$  dürfen wir  $\beta_c h \ll m_0$  annehmen. Dann finden wir

$$m_0 \sim (3\beta_c h)^{1/3}, \quad (T = T_c), \quad (7.34)$$

was mit unserer Annahme verträglich ist. Im Allgemeinen hat man

$$m_0 \sim h^{1/\delta} \quad \text{für } T = T_c. \quad (7.35)$$

In der Molekularfeldnäherung ist  $\delta = 3$ .

Schlußendlich vergleichen wir die Resultate der MFA in der Nähe des Phasenübergangs mit exakten Resultaten. Die Tatsache, dass das MFA-Resultat für  $T_c$  nur von der Anzahl Nachbarn  $q$  über

$$\tilde{J} = qJ \quad (7.36)$$

abhängt, und nicht von der Dimension des Gitters, ist eine der großen Schwächen der Näherung. Die einfache MFA sagt für das eindimensionale Isingmodell einen Phasenübergang bei  $T_c > 0$  voraus, und dies ist offensichtlich inkorrekt. In der folgenden Tabelle werden die MFA-Werte für  $T_c$  mit den best-bekanntesten Werten für  $T_c$  für 2- und 3-dimensionale Gitter verglichen. In jeder Dimension wird die Vorhersage der MFA besser wenn die Anzahl nächster Nachbarn (die Koordinationszahl) zunimmt.

Gitter	$d$	$q$	$T_{\text{MF}}/T_c$	$T_c/T_{\text{MF}}$
Quadrat	2	4	1.763	0.567
Dreieck	2	6	1.648	0.607
einfach kubisch	3	4	1.330	0.752
bcc	3	8	1.260	0.794
fcc	3	12	1.225	0.816

(7.37)

Eine weitere Vorhersage ist, dass in der Nähe der kritischen Temperatur die verschiedenen thermodynamischen Größen ein Potenzverhalten zeigen. In der MFA sind die kritischen

Exponenten  $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$  und  $\delta = 3$  unabhängig von der Dimension. Sie stimmen nicht mit den exakten kritischen Exponenten der Onsagersche Lösung für das 2-dimensionale Isingmodell überein. Weiterhin macht in der MFA die spezifischen Wärme einen Sprung bei  $T_c$ , im Gegensatz zur Onsager-Lösung, in der sie eine logarithmische Singularität am kritischen Punkt hat. Ähnliche Diskrepanzen findet man in 3 Dimensionen. Aber in 4 und mehr Dimensionen sind die kritischen Exponenten der MFA korrekt. In der folgenden Tabelle sind die wichtigsten Exponenten für das Isingmodell tabelliert.

Größe	Exponent	d=2 (exakt)	d=3	MFA
spezifische Wärme	$\alpha$	0 (logar.)	0.113	0 (Sprung)
Ordnungsparameter	$\beta$	1/8	0.324	1/2
Suszeptibilität	$\gamma$	7/4	1.238	1
Zustandsgleichung	$\delta$	15	4.82	3
	$\eta$	1/4	0.031(5)	0
Korrelationslänge	$\nu$	1	0.629(4)	1/2
Potenzgesetz bei $T_c$	$\eta$	0	1/4	0.04

Wir fassen zusammen:

- Die Dimension geht in der MFA verloren. Der einzige  $d$ -abhängige Parameter ist  $\tilde{J}$ .
- Die Art des Phasenübergangs wird für  $d \geq 2$  richtig und  $d = 1$  falsch vorausgesagt.
- Für  $d \geq 2$  ist die kritische Temperatur der MFA zu hoch und das kritische Verhalten (die Art der Singularität bei  $T = T_c$  und  $h = 0$ ) wird inkorrekt wiedergegeben.
- Die MFA zeigt nicht, dass kurzreichweitige Wechselwirkungen zu langreichweitigen Korrelationen führen können.

## 7.2 MFA für Gitterfeldtheorien

Im vorherigen Abschnitt haben wir die Molekularfeldnäherung für das freie Energiefunktional von Spinmodellen bestimmt. Nun übertragen wir die Ergebnisse um die Molekularfeldnäherung für die effektive Wirkung  $\Gamma[\varphi]$  zu gewinnen. Dazu lässt man bei der Minimierung in (6.48) nur Produktmasse zu,

$$d\mu(\phi) = \prod_x d\nu_x(\phi_x), \quad d\nu_x(\phi) = p_x(\phi)d\mu(\phi), \quad (7.38)$$

die folgende Nebenbedingung erfüllen,

$$\int d\nu_x(\phi)\phi = \varphi_x. \quad (7.39)$$

Um fortzufahren setzen wir die Standard-Wirkung für das Skalarfeld voraus,

$$S[\phi] = \frac{1}{2} \sum_x (\nabla\phi_x)^2 + \sum_x V(\phi_x). \quad (7.40)$$

Mit Berücksichtigung der Nebenbedingung (7.39) findet man für die gemittelte Wirkung

$$\int d\nu(\phi)S[\phi] = \frac{1}{2} \sum_x (\nabla\varphi_x)^2 + \sum_x \int d\nu_x(\phi) V(\varphi_x, \phi), \quad (7.41)$$

wobei wir das verschobene Potential

$$V(\varphi, \phi) = d(\varphi - \phi)^2 + V(\phi). \quad (7.42)$$

mit  $V(\phi, \phi) = V(\phi)$  einführt. Eine ähnliche Rechnung wie für die Spinmodelle führt auf folgende Molekularfeldnäherung für die effektive Wirkung,

$$\Gamma_{\text{MF}}[\varphi] = \frac{1}{2} \sum_x (\nabla\varphi_x)^2 + \sum_x u_{\text{MF}}(\varphi_x). \quad (7.43)$$

Das effektive Potential  $u_{\text{MF}}$  ist bis auf den additiven Term  $-d\varphi^2$  gleich der Legendre Transformierten von  $\log z_0(j)$ , wobei  $z_0(j)$  die Laplace-Transformierte von  $d\phi^2 + V(\phi)$  ist,

$$u_{\text{MF}}(\varphi) = -d\varphi^2 + (\mathcal{L}w_0)(\varphi) \quad \text{mit} \quad z_0(j) = e^{w_0(j)} = \log \int d\mu(\phi) e^{j\phi - d\phi^2 - V(\phi)}. \quad (7.44)$$

Für ein translationsinvarianten System mit ferromagnetischer Kopplung wird  $\varphi_x$  ortsunabhängig sein. Für ein homogenes  $\varphi$  ist die effektive Wirkung proportional zur Größe des Gitters  $\beta V$  und zum *effektiven Potential*  $u_{\text{MF}}$  in der Molekularfeldapproximation,

$$\Gamma_{\text{MF}}[\varphi] = \beta V u_{\text{MF}}(\varphi), \quad \varphi_x = \varphi. \quad (7.45)$$

Man kann zeigen, dass  $u_{\text{MF}}$  auch die Molekularfeldapproximation für das *constraint effective potential* [58] ist, und deshalb ist

$$dP_{\text{MF}}(\varphi) = \frac{1}{Z_{\text{MF}}} e^{-\beta V u_{\text{MF}}(\varphi)} d\mu(\varphi) \quad (7.46)$$

die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auffinden des mittleren konstanten Feldes  $\varphi$  in der Molekularfeldnäherung, siehe [63]. Da  $u_{\text{MF}}$  das konvexe effektive Potential  $u$  nach oben beschränkt, ist seine konvexe Hülle

$$(\mathcal{L}^2 u_{\text{MF}})(\varphi) \geq u(\varphi) \quad (7.47)$$

eine noch bessere Approximation für  $u(\varphi)$ . Diese verbesserte Approximation heisst *Maxwell-Konstruktion*.

Für die freie Theorie mit Potential  $V(\phi) = \frac{1}{2}m^2\phi^2$  ist bis auf eine additive Konstante

$$w_0(j) = \frac{1}{2} \frac{j^2}{m_d^2} \Rightarrow (\mathcal{L}w_0)(\varphi) = \frac{1}{2} m_d^2 \varphi^2, \quad m_d^2 = m^2 + 2d,$$

und deshalb ist das effektive Potential gleich dem klassischen Potential,  $u_{\text{MF}}(\varphi) = V(\varphi)$ . Für eine wechselwirkende  $\phi^4$ -Theorie mit Potential

$$V(\phi) = \frac{m^2}{2}\phi^2 + \frac{\lambda}{4}\phi^4 \quad (7.48)$$

lautet die strikt konvexe „Schwinger-Funktion“

$$w_0(j) = \log \int d\phi \exp \left( j\phi - \frac{m_d^2}{2}\phi^2 - \frac{\lambda}{4}\phi^4 \right). \quad (7.49)$$

Für die Lokalisierung eines Phasenübergangs im Raum der Parameter  $(m, \lambda)$  bestimmen wir die zweite Ableitung von  $w_0(j)$  am Ursprung,

$$w_0''(0) = \frac{4z}{m_d^2} \frac{K_{3/4}(z) - K_{1/4}(z)}{K_{1/4}(z)}, \quad z = \frac{m_d^4}{8\lambda}. \quad (7.50)$$

Für das  $\mathbb{Z}_2$ -symmetrische Potential (7.48) hat das ebenfalls symmetrische  $w_0(j)$  seinen Minimum am Ursprung und  $\varphi(j=0) = 0$ . Nach (5.59) ist die Krümmung von  $\mathcal{L}w_0$  am Ursprung gleich

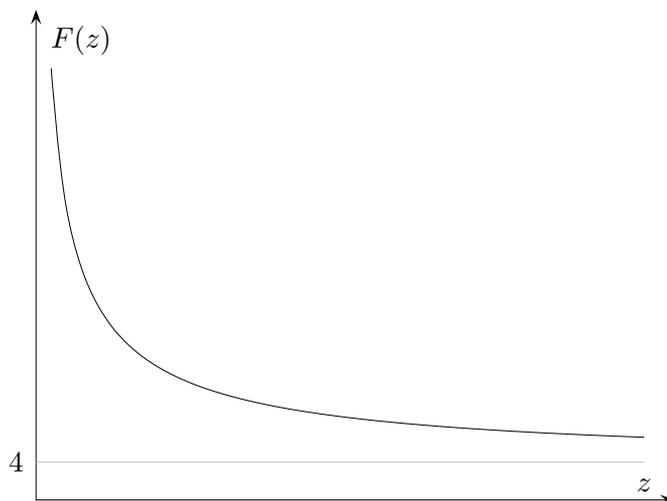
$$(\mathcal{L}w_0)''(0) = \frac{1}{w_0''(0)} \quad (7.51)$$

Deshalb ändert das Vorzeichen der Krümmung von  $u_{\text{MF}}$  in (7.44) am Ursprung für

$$2d = \frac{m_d^2}{4z} \frac{K_{1/4}(z)}{K_{3/4}(z) - K_{1/4}(z)} \iff \frac{8d}{m_d^2} = \frac{1}{z} \frac{K_{1/4}(z)}{K_{3/4}(z) - K_{1/4}(z)} \equiv F(z). \quad (7.52)$$

Die Funktion  $F(z)$  ist in der folgenden Abbildung geplottet. Für positive  $z$  nimmt sie

monoton ab und strebt für große  $z$  gegen 4. Daraus folgt, dass (7.52) nur für  $m^2 < 0$  eine Lösung besitzt. Für  $z \rightarrow 0$  strebt  $F(z)$  gegen positiv Unendlich. Also gibt es für jedes  $m^2 < 0$  eine Lösung  $\lambda(m^2)$  dieser Gleichung.



Für schwach gekoppelte Systeme ist  $z \gg 1$  und wir dürfen die asymptotischen Entwicklungen der Kelvin-Funktionen  $K_\nu$  benutzen. Dann vereinfacht sich (7.52) zu

$$-\frac{m^2}{2d} = \frac{3}{8z} - \frac{3}{8z^2} + \dots = \frac{3\lambda}{m_d^4} \left( 1 - \frac{8\lambda}{m_d^4} + \dots \right). \quad (7.53)$$

Vernachlässigen wir auf der rechten Seite Terme der Ordnung  $O(\lambda^3)$ , dann hat diese Gleichung die beiden Lösungen

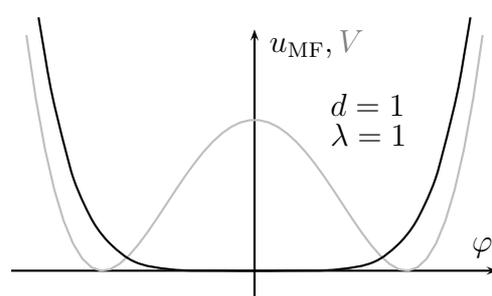
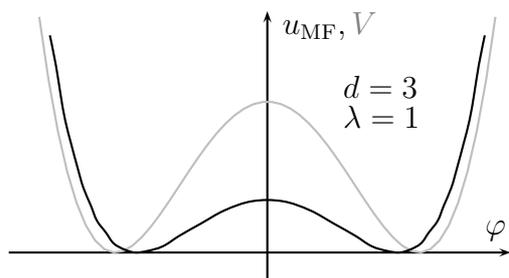
$$\lambda(m) = \left( \frac{2d + m^2}{4} \right)^2 \left( 1 \pm \sqrt{1 + \frac{16m^2}{3d}} \right). \quad (7.54)$$

Nur für das negative Vorzeichen der Wurzel verschwindet, wie erwartet, die „kritische Masse“ für  $\lambda = 0$ . Für diese Lösung der Parameter  $m^2$  negativ für positive  $\lambda$ .

In den folgenden Abbildungen sind das effektive Potential  $u_{\text{MF}}$  und das klassischen Potential

$$V(\phi) = \lambda(\phi^2 - 1)^2, \quad (7.55)$$

für verschiedene Werte von  $\lambda$  abgebildet. Der Graph von  $V(\phi)$  ist in grau, derjenige von  $u_{\text{MF}}$  in schwarz geplottet. Das octave-Programm zur Berechnung von  $u_{\text{MF}}$  findet sich im Anhang zu diesem Kapitel.

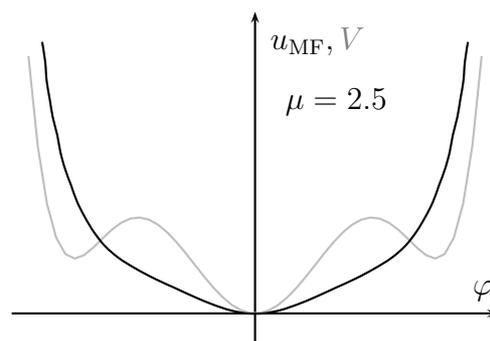
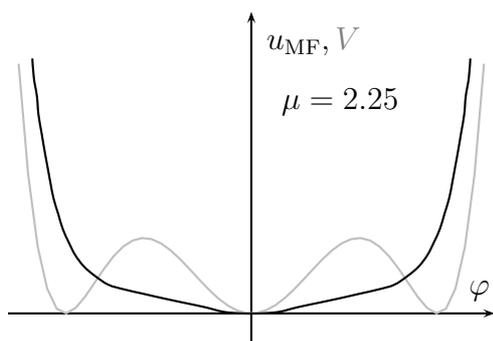
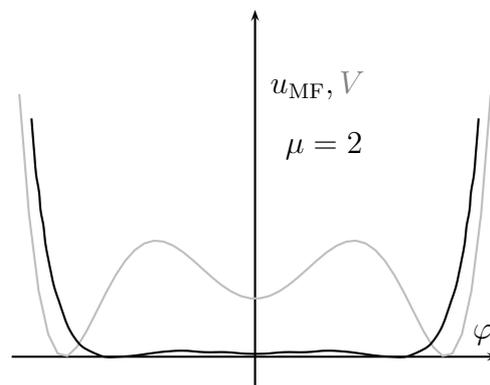
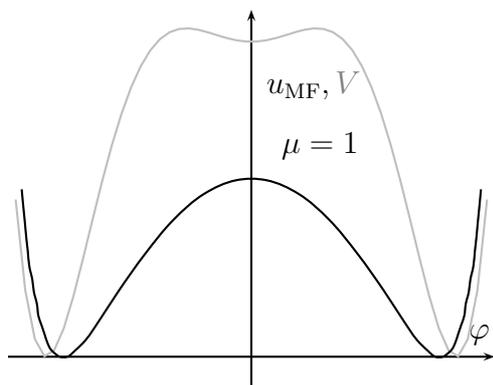


Mit zunehmender Dimension liegen die Minimas des nicht-konvexen  $u_{\text{MF}}$  näher an den Minimas des klassischen Potentials.

In den folgenden Abbildungen sind das  $\mathbb{Z}_2$ -symmetrische klassische Potential

$$V(\phi) = \phi^6 - 3\phi^4 + \mu\phi^2 \quad (7.56)$$

und das effektive Potential  $u_{\text{MF}}$  in 3 Dimensionen für verschiedene Werte von  $\mu$  geplottet.



Das System zeigt in der Molekularfeldnäherung einen Phasenübergang schwach erster Ordnung. Für  $\mu$  etwa kleiner 2 liegt eine gebrochene Phase vor. Für  $\mu \approx 2$  springt der Ordnungsparameter auf den Wert 0.

## 7.3 Programme zu Kapitel 7

Mit dem folgende octave-Programm `mfscalar.m` wurde das effektive Potential  $u_{\text{MF}}$  in der Molekularfeldnäherung für das klassische Potential

$$V(\phi) = \lambda(\phi^2 - 1)^2 \quad (7.57)$$

berechnet. Einige Plots finden sich auf der Seite 122. Die Dimension  $d$  der Raumzeit kann im Quellcode geändert werden.

```
function mfscalar;
# berechnet das effektive Potential fuer Skalarfeldtheorie
# mit V(phi)=lam*(phi**2-1)**2 in der Molekularfeldnaeherung.
# Dimension d und Kopplung lam in Quellcode eingeben!
# Speicherung in mfscalar.dat
#
d=3; # Dimension
lam=input("lambda_");
a=(d-2*lam);
closeplot;
Nx=501; eps=2/(Nx-1); # Nx Stuetzstellen: ungerade!
x=linspace(-10,10,Nx);x2=x.*x; x4=x2.*x2;eps=eps/3;
z=eps*exp(-a*x2-lam*x4-lam);
j=linspace(-20,20,80)';N=length(j);
#_Fuer_Simpson_Integration;
for_i=2:2:Nx-1;
    _z(i)=4*z(i);
endfor;
for_i=3:2:Nx-2;
    _z(i)=2*z(i);
endfor;
int0=zeros(N,Nx);int1=int2=int0;
L=zeros(N,1);s0=s1=umf=umf1=L;
for_i=1:N
    _int0(i,:)=z.*exp(j(i)*x);
    _s0(i)=sum(int0(i,:));
    _int1(i,:)=x.*int0(i,:);
    _s1(i)=sum(int1(i,:));
endfor;
#_Schwingerfunktion
w0=log(s0);
L=s1./s0;
#_effektives_Potential_berechnen,_plotten_und_speichern
umf=-d*L.*L+j.*L-w0;
#_Minimum_suchen_um_Potential_zu_normieren
[ min1 , nmin]=min(umf);_#_Minimum_von_u
```

```

nmin=max(nmin,N+1-nmin);
umf(nmin)=umf(nmin)+.5; # Markierung des Minimums
data=[L,umf-min1]; # Minimum von u auf 0 setzen
# klassisches Potential
L2=L.*L;
V=lam*L2.*L2-2*lam*L2+lam;
[vmin1,vnmin]=min(V);
datav=[L,V-vmin1];
gplot[-1.5:1.5]_data,datav;
mfscalar=fopen("mfscalar.dat","w","native");
for i=1:N
fprintf(mfscalar,"%4.2f,%4.2f",L(i),umf(i)-min1);
if (rem(i,5)==0) fprintf(mfscalar,"\n");
endif;
endfor;
fclose(mfscalar);
endfunction;

```

## 7.4 Aufgaben

### Aufgabe 13: Molekularfeldnäherung des $\mathbb{Z}_3$ -Modells

Gegeben ist die Hamiltonfunktion

$$H = - \sum_{x,y \in \Lambda} J_{xy} \cos(\theta_x - \theta_y) \quad \text{mit} \quad \theta_x \in \left\{ \frac{2\pi k}{3} \mid k = 0, 1, 2 \right\}.$$

Bestimmen Sie die Zustandssumme  $Z = \sum_{\omega \in \Omega} \exp(-\beta H(\omega))$  in der Molekularfeldnäherung. Führen Sie als Ordnungsparameter

$$m = \frac{1}{V} \sum_{x \in \Lambda} \exp(i\theta_x)$$

ein und drücken Sie die Hamiltonfunktion durch  $m$  und  $\bar{m}$  aus. Wieviele Konfigurationen gibt es für ein vorgegebenes  $m$ ? Geben Sie  $f(m, \bar{m})$  in

$$Z = \sum_m \exp(-\beta V f(m, \bar{m}))$$

an und diskutieren Sie das Ergebnis.

*Hinweis:* Führen Sie  $a_0, a_1, a_2$  ein, wobei  $a_k$  die Anzahl der Gitterplätze mit  $\theta = \frac{2\pi k}{3}$  ist. Drücken Sie  $m$  durch die  $a_k$  aus. Sind für ein fixiertes  $m$  und  $V = |\Lambda|$  die  $a_k$  eindeutig bestimmt? Benutzen Sie die  $a_k$  um die Anzahl der Konfigurationen zu bestimmen. Führen

Sie als Ordnungsparameter

$$m = \frac{1}{V} \sum_{x \in \Lambda} \exp(i\theta_x)$$

ein und drücken Sie die Hamiltonfunktion durch  $m$  und  $\bar{m}$  aus. Wieviele Konfigurationen gibt es für ein vorgegebenes  $m$ ? Geben Sie  $f(m, \bar{m})$  in

$$Z = \sum_m \exp(-\beta V f(m, \bar{m}))$$

an und diskutieren Sie das Ergebnis.