

Kapitel 9

Heiße und kalte Spinmodelle

Wir besprechen hier die Hochtemperaturentwicklung in Potenzen von $v = \tanh \beta J$ und die Tieftemperaturentwicklung in Potenzen von $e^{-2\beta J}$ für das Isingmodell. In beiden Entwicklungen werden die Terme einer festen Ordnung durch eine bestimmte Klasse von Graphen auf dem Gitter charakterisiert. Zur Einstimmung betrachten wir die einfache Isingkette.

9.1 Isingkette

Im Zustand mit der geringsten Energie sind alle Spins der Isingkette vollständig ausgerichtet und in diesem Zustand befindet sich das System bei $T = 0$. Was geschieht nun, wenn wir das System leicht erwärmen. Die Energie kann nur durch Umklappen einiger Spins zunehmen. Bei einer festen *tiefen Temperatur* können wir angeregte Zustände mit $1, 2, \dots, N$ umgeklappten Spins betrachten. Zum Beispiel, für ein System mit 5 Spins

$$\begin{array}{cccccc}
 \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & -5J - 5h & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & -5J + 5h \\
 \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & -J - 3h & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & -J + 3h \\
 \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & -J - h & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & -J + h \\
 \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & 3J - h & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & 3J + h
 \end{array}$$

Die Zustandssumme hat die folgende *Tieftemperaturentwicklung* für $e^{-K} \ll 1$:

$$\begin{aligned}
 Z = e^{-\beta E_0} & \left(1 + e^{-10h} + 5e^{-\beta(4J+2h)} + 5e^{-\beta(4J+8h)} \right. \\
 & \left. + 5e^{-\beta(4J+4h)} + 5e^{-\beta(4J+6h)} + 5e^{-\beta(8J+4h)} + 5e^{-\beta(8J+6h)} \right)
 \end{aligned}$$

Die systematische Tieftemperaturentwicklung wird im $2d$ -Modell besprochen.

Bei hohen Temperaturen $K = \beta J \ll 1$ ist der Effekt der Spinwechselwirkung gering und eine Störungsentwicklung im kleinen Parameter K macht Sinn. Wir betrachten die Kette ohne äußeres Magnetfeld und schreiben

$$Z_\Lambda = \sum_w \prod_{\langle x,y \rangle} e^{K s_x s_y}, \quad K = \beta J. \tag{9.1}$$

Wir benutzen die Identität

$$e^{K s_x s_y} = \cosh K + s_x s_y \sinh K = \cosh K (1 + v s_x s_y), \quad v = \tanh K.$$

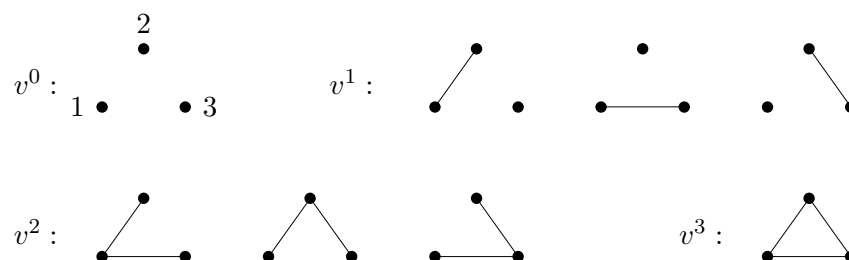
Zum Beweis der Identität betrachte man die beiden Fälle $s_x s_y \in \{-1, 1\}$. Der Parameter v strebt für hohe Temperaturen gegen Null und dient als Entwicklungsparameter. Es folgt

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^p \sum_w \prod_{\langle x,y \rangle} (1 + v s_x s_y), \tag{9.2}$$

wobei p die Anzahl nächster Nachbarn-Paare im Gitter ist, also die Anzahl Wechselwirkungsterme. Für ein hyperkubisches Gitter in d Dimensionen ist $p = Vd$. Wir betrachten wieder ein einfaches Beispiel eines eindimensionalen periodisches Gitters mit 3 Gitterpunkten. Dann ist $p = 3$ und das Produkt (9.2) hat 3 Faktoren, $(1 + v s_1 s_2)(1 + v s_2 s_3)(1 + s_3 s_1)$. Entwickeln wir es in Potenzen von v , dann erhalten wir $2^p = 8$ Terme,

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^3 \sum_{s_1=-1}^1 \sum_{s_2=-1}^1 \sum_{s_3=-1}^1 \left(1 + v(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_1) + v^2(s_1 s_2 s_2 s_3 + s_1 s_2 s_3 s_1 + s_2 s_3 s_3 s_1) + v^3(s_1 s_2 s_2 s_3 s_3 s_1) \right). \tag{9.3}$$

Hier ist es angebracht, eine bijektive Beziehung zwischen den acht Termen und Diagrammen auf dem Gitter herzustellen. Die Menge der zugehörigen acht Diagramme ist in der folgenden Figur gezeigt. Da der Entwicklungsparameter v im Produkt (9.3) in der Form $v s_x s_y$ erscheint, hat ein Diagramm der Ordnung n genau n Linien.



Wegen der Identität

$$\sum_{s_x=-1}^1 s_x^n = \begin{cases} 2 & n \text{ gerade} \\ 0 & n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (9.4)$$

finden wir folgende Zustandssumme für 3 Spins

$$Z = \cosh^3 K (8 + 8v^3) = 2^3 (\cosh^3 K + \sinh^3 K).$$

Nun verallgemeinern auf die Kette mit N Spins. Wir haben gesehen, dass nur Diagramme beitragen, an deren Vertices eine gerade Anzahl von Linien enden. Derartige Diagramme nennt man geschlossen. Für die Isingkette können an einem Vertex höchstens zwei Linien enden (jeder Vertex hat zwei nächste Nachbarn). Obwohl es für N Gitterpunkte 2^N Diagramme gibt, tragen nur diejenigen der Ordnung v^0 (keine Linie) und der Ordnung v^N zu Z_Λ bei. Also ist

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^N (2^N + 2^N v^N) = 2^N (\cosh^N K + \sinh^N K). \quad (9.5)$$

Die Hochtemperaturentwicklung führt bei der Isingkette auf das exakte Resultat für die Zustandssumme.

9.2 2d Ising-Modell

Neben Monte-Carlo Simulationen und der Molekularfeldapproximation sind die Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen in Gittertheorien von großer Bedeutung. Bei der Tieftemperaturentwicklung studiert man die Abweichungen vom Zustand minimaler Energie (oder Wirkung in der Feldtheorie). Sie entspricht der Entwicklung für kleine Kopplungskonstanten in der Feldtheorie. Für kontinuierlich variierende Felder findet man die übliche Störungstheorie (im Kontinuum oder auf dem Gitter). Bei der Hochtemperaturentwicklung entwickelt man um einen zufälligen Zustand. Sie entspricht der starken Kopplungsentwicklung in der Feldtheorie.

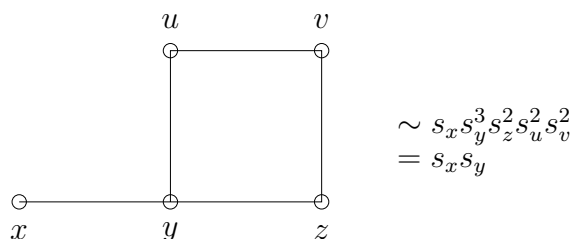
9.2.1 Hochtemperaturentwicklung

Analog zum eindimensionalen Fall schreiben wir für sehr hohe Temperaturen oder $K = \beta J \ll 1$ beziehungsweise $v = \tanh K \ll 1$ die Zustandssumme des 2-dimensionalen Ising-Modells auf dem quadratischen Gitter für verschwindendes Magnetfeld wie folgt um

$$Z = \sum_w \prod_{\langle xy \rangle} e^{K s_x s_y} = (\cosh K)^P \sum_w \prod_{\langle xy \rangle} (1 + v s_x s_y)$$

$$= (\cosh K)^P \sum_w \left(1 + v \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y + v^2 \sum_{\langle xy \rangle \neq \langle x'y' \rangle} s_x s_y s_{x'} s_{y'} + \dots \right). \quad (9.6)$$

Hier bezeichnet P die Anzahl Paare von nächsten Nachbarn. Jedem Spinprodukt wird ein Graph zugeordnet



Die Vertices x, y sind ungerade und die Vertices u, v, z gerade. Ein Graph gibt den Beitrag 2^V zur Zustandssumme falls alle Vertices gerade sind und 0 sonst. Somit ist

$$Z = (\cosh K)^P 2^V \sum_{\ell=0}^P g_\ell v^\ell, \quad (9.7)$$

wobei g_ℓ die Zahl der Graphen aus ℓ Linien mit lauter geraden Vertices ist. g_0 ist 1. Als Beispiel betrachten wir das 2-dimensionale Ising-Modell mit quadratischem Gitter, für das $P = 2V$ ist. Die folgende Tabelle enthält alle Graphen mit und bis zur Ordnung v^8 . Die dritte Spalte enthält die Anzahl Graphen der entsprechenden Sorte.

ℓ	Graphen	Anzahl	g_ℓ
4		V	V
6		$2V$	$2V$
8	 	$4V$ $2V$ $\frac{1}{2}V(V-5)$	$\frac{1}{2}V^2 + \frac{7}{2}V$

Zum Beispiel, die Zahl $V(V-5)/2$ in der letzten Zeile erhält man wie folgt: Die erste der beiden Plaketten kann man irgendwo auf das Gitter legen, also an V verschiedene Orte. Der Mittelpunkt der zweiten Plakette darf dann weder mit demjenigen der ersten Plakette zusammenfallen noch im Mittelpunkt der 4 benachbarten Plaketten liegen. Wir können

sie also an $V - 5$ verschiedene Stellen legen und erhalten $V(V - 5)$ Möglichkeiten die beiden Plakette so zu legen, dass keine ihrer Seiten zusammenfallen. Beim Vertauschen der beiden Plaketten erhalten wir aber denselben Graphen, so dass wir schlussendlich $V(V - 5)/2$ verschiedene Graphen finden.

Damit hat die Zustandssumme des 2-dimensionalen Ising-Modells die Hochtemperaturrentwicklung

$$Z = (\cosh K)^P 2^V \left(1 + Vv^4 + 2Vv^6 + \frac{1}{2}(V^2 + 7V)v^8 + \dots \right). \quad (9.8)$$

Den thermodynamischen Grenzfall erhält man durch formales Rechnen mit Potenzreihen. Dazu machen wir wegen

$$Z = \exp(-V\beta f) \quad (9.9)$$

folgenden Ansatz für die frei Energiedichte,

$$e^{-\beta f} = (\cosh K)^{P/V} \cdot 2 \cdot \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} v^{\ell}. \quad (9.10)$$

Aus (9.9) folgt dann mit (9.7)

$$\begin{aligned} 1 + \sum_{\ell \geq 1} g_{\ell} v^{\ell} &= \left(1 + \sum_{\ell \geq 1} c_{\ell} v^{\ell} \right)^V \\ &= 1 + \binom{V}{1} (c_1 v + c_2 v^2 + \dots) \\ &\quad + \binom{V}{2} (c_1 v + c_2 v^2 + \dots)^2 + \dots \end{aligned}$$

und durch Koeffizientenvergleich erhält man c_0, \dots, c_n aus g_0, \dots, g_n . Dabei fällt V exakt heraus, falls die g_{ℓ} für ein genügend großes Gitter auf dem Torus berechnet werden.

Für das 2-dimensionale Ising-Modell auf dem quadratischen Gitter ist $Z \sim (1 + Vv^4 + \dots)$ und deshalb ist $c_1 = c_2 = c_3 = 0$. Man findet

$$\begin{aligned} &Vv^4 + 2Vv^6 + \frac{1}{2}(V^2 + 7V)v^8 + \dots \\ &= Vc_4 v^4 + Vc_6 v^6 + \left(Vc_8 + \frac{1}{2}(V^2 - V)c_4^2 \right) v^8 + \dots \end{aligned}$$

oder $c_4 = 1$, $c_6 = 2$ und $c_8 = 4$. Deshalb ist

$$e^{-\beta f} = 2(\cosh K)^2 (1 + v^4 + 2v^6 + 4v^8 + O(v^{10})). \quad (9.11)$$

Daraus kann man die Potenzreihe für die freie Energiedichte ausrechnen.

Korrelationsfunktionen

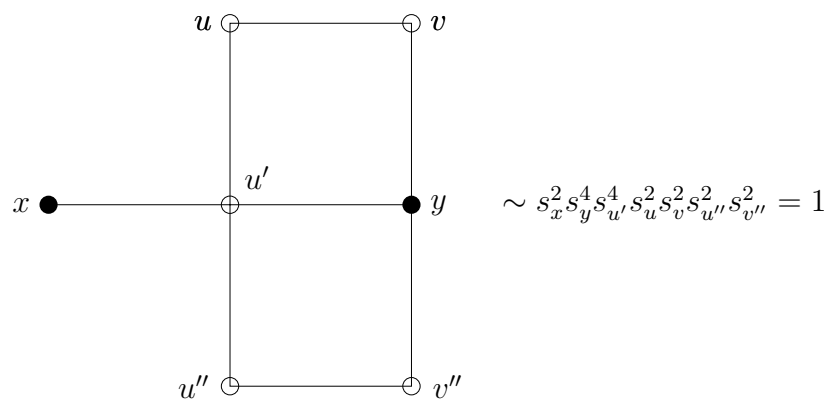
Oberhalb der kritischen Temperatur verschwindet für $h = 0$ die Magnetisierung, $\langle s_x \rangle = 0$, und die Suszeptibilität ist

$$\chi = \frac{1}{V} \sum_{xy} \langle s_x s_y \rangle = \sum_y \langle s_x s_y \rangle. \tag{9.12}$$

Nun wird wieder jedem Term in der Hochtemperaturentwicklung

$$\langle s_x s_y \rangle = \frac{\cosh^P K}{Z} \sum_w s_x s_y \left(1 + v \sum_{\langle uv \rangle} s_u s_v + v^2 \sum_{\langle uv \rangle \neq \langle u'v' \rangle} s_u s_v s_{u'} s_{v'} + \dots \right) \tag{9.13}$$

ein eindeutiger Graph zugeordnet. Zum Beispiel



Dieser Graph trägt mit 2^V zur Summe über alle Konfigurationen in (9.13) bei. Ein Graph trägt genau mit 2^V bei, wenn die Vertices x und y ungerade, und alle anderen Vertices gerade sind. Andere Graphen tragen wegen

$$\sum_{s_x=-1}^1 s_x^n = \begin{cases} 2 & n \text{ gerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

nicht bei. Der Faktor $\cosh^P K \cdot 2^V$ kann gegen den gleichen Faktor von Z in (9.8) gekürzt werden. Es folgt das

Lemma Die Zweipunktsfunktion hat folgende Hochtemperaturentwicklung,

$$\langle s_x s_y \rangle = \frac{\sum_{\ell} g'_{\ell} v^{\ell}}{\sum_{\ell} g_{\ell} v^{\ell}}$$

wobei die g'_ℓ die Anzahl Graphen mit ℓ Linien ist, deren Vertices x und y ungerade und alle anderen Vertices gerade sind.

Aus diesem Lemma folgt unmittelbar das

Korollar *Ist ℓ kleiner als die Länge $d(x, y)$ des kürzesten Weges auf dem Gitter von x nach y , dann verschwindet g'_ℓ .*

Wäre das Korollar nicht wahr, dann gäbe es einen Graphen mit $< \ell$ Linien, für den x, y ungerade und alle anderen Vertices gerade wären. Die Linien könnten die Punkte x und y also nicht verbinden und der Graph bestünde aus zwei unverbundenen Subgraphen. Da für jeden Graphen die Relation

$$\sum_{\text{Vertices}} \text{Vertexordnung} = 2 \cdot \text{Anzahl Linien}$$

gilt, wobei die Ordnung eines Vertex die Anzahl der einlaufenden Linien ist, muss die Summe der Vertexordnungen für jeden Subgraph gerade sein. Aber die Ordnung des zu x gehörenden Subgraphen ist

$$\text{Ord}(x) + \text{gerade Zahl} = \text{ungerade},$$



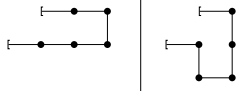
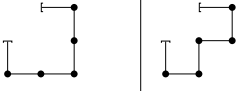
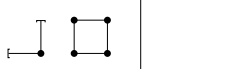
im Gegensatz zu der Forderung, dass diese Zahl gerade sein muss. Also gibt es keinen zulässigen Graphen der Ordnung $< \ell$.

Für das 2-dimensionale Ising-Modell auf dem quadratischen Gitter gilt also

$$\langle s_x s_y \rangle = O(v^{d(x,y)}) = O(e^{-d(x,y)/\xi}), \quad \frac{1}{\xi} = \log \frac{1}{v} \gg 1, \quad (9.14)$$

wobei $d(x, y)$ der kleinste Abstand von x und y auf dem Gitter ist. Die Korrelationslänge wird mit zunehmender Temperatur kleiner. Die thermischen Fluktuation unterdrücken Korrelationen über größere Distanzen.

Wollen wir die Suszeptibilität χ bis zur Ordnung v^n berechnen, so müssen wir in der Summe (9.12) nur Zweipunktsfunktionen $\langle s_x s_y \rangle$ mit $d(x, y) \leq n$ berücksichtigen, und diese nur bis zur Ordnung v^n . In jeder Ordnung von v ist χ daher eine endliche Summe. Bei der formalen Division der Potenzreihen fällt V wieder exakt heraus. Zum Beispiel, für Gitterpunkte x, y , deren Koordinaten sich um 1 unterscheiden, so dass $d(x, y) = 2$ ist, finden wir folgende Graphen bis zur Ordnung v^6 :

ℓ	Graphen	Anzahl	g'_ℓ
2		2	2
4		4	4
6		3×4	$2V + 10$
		2×2	
		$2(V-3)$	

Wir finden die Reihen

$$\langle s_x s_y \rangle = (2v^2 + 4v^4 + (2V + 10)v^6 + \dots) / (1 + Vv^4 + \dots),$$

wobei der Nenner die führenden Terme in der Hochtemperatur-Entwicklung von Z enthält. Es ergibt sich die Reihe

$$\langle s_x s_y \rangle = 2v^2 + 4v^4 + 10v^6 + O(v^8) \tag{9.15}$$

für die betrachtete Zweipunktsfunktion. Diese Reihe tritt in der Suszeptibilität χ viermal auf. Berücksichtigt man die Graphen aller Zweipunktsfunktionen, deren Aufpunkte x, y einen Abstand ≤ 6 haben, so findet man folgende Hochtemperaturentwicklung für die Suszeptibilität,

$$\chi = 1 + 4v + 12v^2 + 36v^3 + 100v^4 + 276v^5 + 740v^6 + \dots \tag{9.16}$$

Mit der Taylorreihe

$$v = \tanh K = K - \frac{K^3}{3} + \frac{2K^5}{15} - \frac{17}{315}K^7 + \dots$$

erhält man die Reihenentwicklung

$$\chi = \sum_{\ell} a_{\ell} K^{\ell}, \quad K = J/T. \tag{9.17}$$

mit den Koeffizienten

ℓ	0	1	2	3	4	5	6
a_ℓ	1	4	12	34.666	92	240.543	611.200

Extrapolation zum kritischen Punkt

In der Reihe (9.17) sind alle Koeffizienten a_ℓ positiv. Falls die Reihe einen Konvergenzradius $R > 0$ hat, ist χ analytisch auf der Kreisscheibe mit Mittelpunkt 0 und Radius R und hat eine Singularität bei $K = R$. Wir wollen annehmen dies sei der kritische Wert $K_c = J/T_c$. Wir benutzen das *Quotientenkriterium*

$$R = \lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{a_\ell}{a_{\ell-1}} = \frac{J}{T_c}. \quad (9.18)$$

Wir versuchen den kritischen Exponenten γ und K_c in der Interpolationsformel

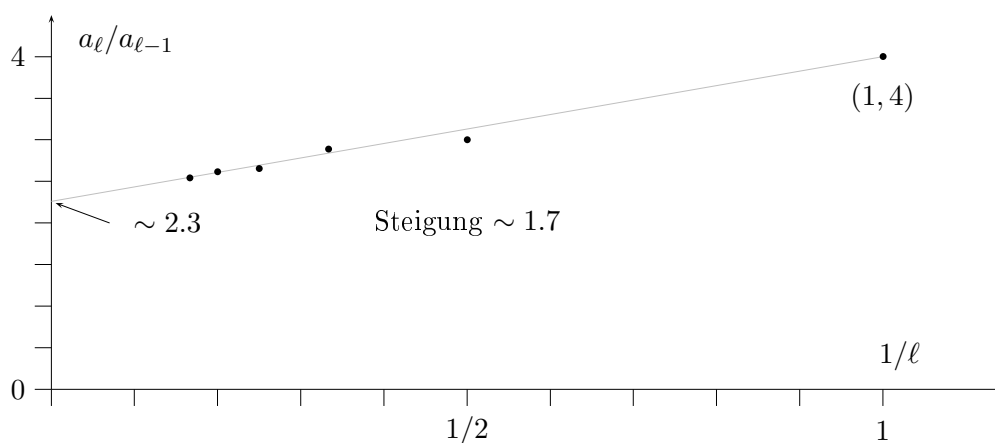
$$\begin{aligned} f(K) &= (1 - K/K_c)^{-\gamma} = 1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+\ell-1)}{\ell!} \left(\frac{K}{K_c}\right)^\ell \\ &\equiv \sum a'_\ell K^\ell \end{aligned}$$

so zu wählen, dass diese Reihe mit der Hochtemperaturentwicklung (9.17) möglichst gut übereinstimmt. Die Quotienten

$$\frac{a'_\ell}{a'_{\ell-1}} = \frac{1}{K_c} + \frac{\gamma-1}{K_c} \frac{1}{\ell},$$

sind eine lineare Funktion in $1/\ell$. Aus der Steigung der Geraden und dem Wert für $\ell \rightarrow \infty$ kann man die kritische Temperatur und den kritischen Exponenten ablesen.

a_1/a_0	a_2/a_1	a_3/a_2	a_4/a_3	a_5/a_4	a_6/a_5
4	3	2.8888	2.6539	2.6146	2.5409



Eine linearer Fit an die Quotienten $a_\ell/a_{\ell-1}$ ergibt

$$\frac{1}{K_c} \sim 2.3 \quad \text{und} \quad \gamma \sim \frac{1.7}{2.3} + 1 = 1.74.$$

Für die kritische Temperatur finden wir den Wert

$$T_c = 2.3 J \quad \text{bzw.} \quad T_c \sim \frac{2.3}{4} T_{\text{MF}} \sim 0.575 T_{\text{MF}}, \quad T_{\text{MF}} = 4J.$$

Dies liegt bereits relativ nahe am exakten Wert für die kritische Temperatur des 2d Ising-Modells,

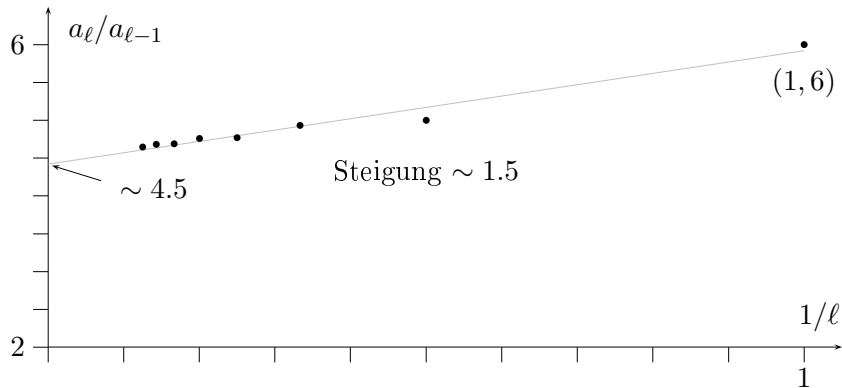
$$\frac{T_c}{T_{\text{MF}}} = \frac{1}{2 \log(1 + \sqrt{2})} \sim 0.5673. \quad (9.19)$$

Für das dreidimensionale Ising-Modell haben GAUNT und SYKES die Hochtemperaturentwicklung bis zur Ordnung 20 berechnet [42]. Die führenden Terme sind

$$\chi = 1 + 6K + 30K^2 + 148K^3 + 706K^4 + \frac{16804K^5}{5} + \frac{47260K^6}{3} + \frac{7744136K^7}{105} + \frac{35975026K^8}{105} + \dots \quad (9.20)$$

Die Quotienten der Koeffizienten sind

a_1/a_0	a_2/a_1	a_3/a_2	a_4/a_3	a_5/a_4	a_6/a_5	a_7/a_6	a_8/a_7
6	5	4.9333	4.7703	4.7603	4.6874	4.6818	4.6455



Eine linearer Fit an die Quotienten $a_\ell/a_{\ell-1}$ ergibt

$$\frac{1}{K_c} \sim 4.5 \quad \text{und} \quad \gamma \sim \frac{1.5}{4.5} + 1 = 1.33.$$

Wegen $T_{\text{MF}} = 6J$ ist

$$\frac{T_c}{T_{\text{MF}}} \sim \frac{4.5}{6} = 0.75,$$

und dieser Wert ist weniger als 1 Prozent vom best-bekanntem Wert entfernt. Die Extrapolation für den kritischen Exponenten γ ist allerdings nicht so gut.

9.2.2 Tieftemperaturenwicklung

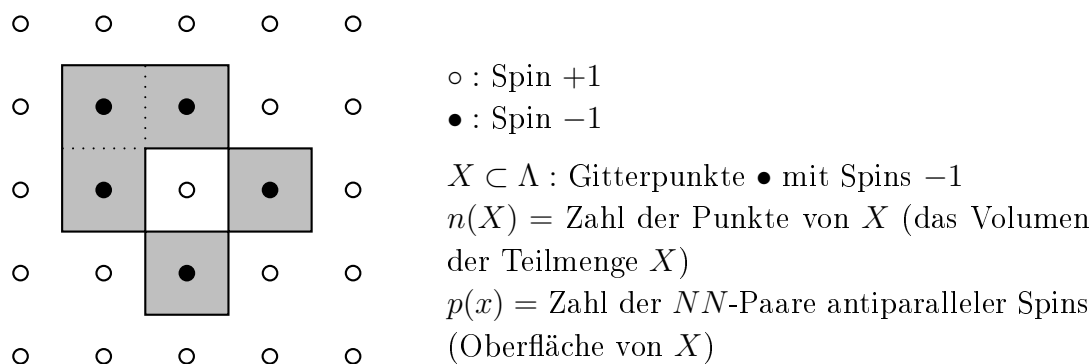
Für ein positives Magnetfeld h hat die geordnete Konfiguration

$$w_0 = \{s_x = 1 | x \in \Lambda\} \tag{9.21}$$

die niedrigste Energie,

$$E_0 = -PJ - Vh. \tag{9.22}$$

Diese Grundzustandsenergie hat die Vielfachheit $g_0 = 1$, ist also nicht entartet. Angeregte Zustände erhält man durch das Umklappen von Spins an gewissen Punkten \bullet des Gitters. Einer Konfiguration w ist eindeutig durch die Menge $X(w)$ der Gitterpunkte mit umgeklappten Spins charakterisiert. Im folgenden Beispiel enthält X 5 Punkte, $n(X) = 5$ und $p(X) = 12$ nächste Nachbarn mit verschiedenen Spins.



Man kann X wie in der Figur durch ein Polygon (Polyeder) darstellen. Auf dem Torus ist allerdings nicht klar, was das Innere oder äußere des Graphen von X ist. Die Konfigurationen w und $-w$ haben identische Graphen.

Thermodynamische Potentiale

Jeder Gitterpunkt \bullet mit Spin -1 gibt einen Beitrag $2h$ zur Energie, jedes nächste Nachbarn-Paar $\bullet\circ$ einen Beitrag $2J$, also ist

$$E(X) = E_0 + 2J p(X) + 2h n(X). \tag{9.23}$$

Ist g_n die Vielfachheit der Anregungsenergie E_n , dann lautet die Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_n g_n e^{-\beta(E_n - E_0)} = e^{\beta(PJ + Vh)} \Xi \tag{9.24}$$

und Ξ hat folgende Tieftemperaturentwicklung:

$$\Xi(z, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n F_V(n, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \sum_{p=0}^{\infty} \zeta^p G_V(n, p). \tag{9.25}$$

Für eine ferromagnetische Kopplung $J > 0$ ist bei tiefen Temperaturen

$$\zeta = e^{-2\beta J} \ll 1 \tag{9.26}$$

und ζ darf als Entwicklungsparameter gewählt werden. Wir dürfen annehmen, dass h positiv ist, oder dass

$$z = e^{-2\beta h} < 1 \tag{9.27}$$








gilt. Dann ist der Grundzustand geordnet und die Mengen X, X' zu den Konfigurationen $w, -w$ haben verschiedene statistische Gewichte, nämlich

$$X : z^n \zeta^p \quad \text{und} \quad X' : z^{V-n} \zeta^p.$$

Im thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$ verschwindet das Gewicht von X' relativ zu demjenigen von X . Dies ist der Grund dafür, dass man im thermodynamischen Limes für $h \downarrow$ eine spontane Magnetisierung erwarten kann. Setzt man dagegen $h = 0$ bei endlichem Volumen, dann verschwindet wegen $E(X) = E(X')$ der Mittelwert von s_x und es gibt keine Magnetisierung.

Man beachte, dass die Variablen z und ζ eine andere Bedeutung haben als im letzten Kapitel. Der Koeffizient $G_V(n, p)$ in (9.25) ist gleich der Anzahl Konfigurationen X mit Volumen $n(X) = n$ und Oberfläche $p(X) = p$. Die Reihe (9.25) kann auch als grosskanonische Zustandssumme eines *Gittergases* mit Wechselwirkung $2J$ zwischen NN-Paaren $\circ \bullet$ und chemischen Potential $\mu = -2h$ interpretiert werden.

Wie in der Hochtemperaturentwicklung muss man die auftretenden Graphen und ihre Anzahl bestimmen. Für das 2d-Ising-Modell sind die führenden Graphen

n	p	Graphen	Anzahl	$F_V(n, \zeta)$	
1	4		V	$V\zeta^4$	
2	6		$2V$	$2V\zeta^6$	
	8		$\frac{1}{2}V(V-5)$	$\frac{1}{2}V(V-5)\zeta^8$	
3	8		$2V$	$6V\zeta^8$	
			$4V$		
	10		$2V(V-8)$		$2V(V-8)\zeta^{10}$
	12		$\binom{V}{3} - 6V - 2V(V-8)$		$\frac{1}{6}(V^3 - 15V^2 + 62V)\zeta^{12}$

Die Analogie zu den Hochtemperaturgraphen ist leider nur ein 2-dimensionales Eigenheit. Wir werden darauf zurückkommen. Im Gegensatz zu Z existiert die freie Energiedichte

im thermodynamischen Limes und wir machen den Ansatz

$$\Xi(z, \zeta) = \xi(z, \zeta)^V \quad \text{mit} \quad \xi(z, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n c_n(\zeta). \quad (9.28)$$

Der Vergleich der Koeffizienten von z^n in

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} z^n F_V(n, \zeta) &= (1 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots)^V \\ &= 1 + zVc_1 + z^2V \left(c_2 + \frac{1}{2}(V-1)c_1^2 \right) + \dots \end{aligned}$$

liefert die V -unabhängigen Koeffizienten c_n . Zum Beispiel ergibt sich für c_1, c_2, c_3 :

$$\begin{aligned} z^1: \quad \zeta^4 = c_1 &\implies c_1 = \zeta^4 \\ z^2: \quad 2\zeta^6 + \frac{1}{2}(V-5)\zeta^8 = c_2 + \frac{1}{2}(V-1)c_1^2 &\implies c_2 = 2\zeta^6 - 2\zeta^8 \\ z^3: \quad 6\zeta^8 + 2(V-8)\zeta^{10} + \frac{1}{6}(V^2 - 15V + 62)\zeta^{12} \\ &= c_3 + (V-1)c_1c_2 + \frac{1}{6}(V-1)(V-2)c_1^3 \implies c_3 = 6\zeta^8 - 14\zeta^{10} + 8\zeta^{12} \end{aligned}$$

und damit

$$\xi(z, \zeta) = 1 + z\zeta^4 + z^2(2\zeta^6 - 2\zeta^8) + z^3 \left(6\zeta^8 - 14\zeta^{10} + \frac{26}{3}\zeta^{12} \right) + \dots \quad (9.29)$$

Um die freie Energiedichte zu gewinnen, müssen wir die Logarithmus-Funktion in

$$f = -\frac{P}{V}J - h - \frac{1}{\beta} \log \xi \quad (9.30)$$

entwickeln. Da ξ von der Ordnung 1 und $F_V(n, \zeta)$ von der Ordnung V ist, folgt mit

$$\begin{aligned} \log \Xi &= V \log \xi = \log (1 + zF_V(1, \zeta) + z^2F_V(2, \zeta) + \dots) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} z^n F_V(n, \zeta) + O(V^2), \end{aligned}$$

dass sich die höheren Ordnungsterme in der Entwicklung der Logarithmusfunktion wegheben. Deshalb ist

$$\log \xi = \sum_{n=0}^{\infty} z^n g_n(\zeta), \quad g_n(\zeta) = \frac{d}{dV} F_V(n, \zeta) \Big|_{V=0}. \quad (9.31)$$

Für das $2d$ -Ising-Modell erhalten wir

$$\log \xi = z\zeta^4 + z^2 \left(2\zeta^6 - \frac{5}{2}\zeta^8 \right) + z^3 \left(6\zeta^8 - 16\zeta^{10} + \frac{31}{3}\zeta^{12} \right) + \dots, \quad (9.32)$$

was man auch mit (9.29) erhält.

Magnetisierung

Die Magnetisierung gewinnen wir durch Ableiten der freien Energiedichte nach h ,

$$\begin{aligned} m(\beta, h) &= -\frac{\partial}{\partial h} f \stackrel{(9.30)}{=} 1 + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \log \xi \\ &= 1 - 2z \frac{\partial}{\partial z} \log \xi = 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n z^n g_n(\zeta). \end{aligned} \quad (9.33)$$

Die spontane Magnetisierung ist dann

$$m(\beta, h = 0) = 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n g_n(\zeta). \quad (9.34)$$

Wichtig ist, dass in 2 und mehr Dimensionen die minimale Oberfläche eines Graphen mit dem Volumen gegen unendlich strebt. Für $n = 9$ zum Beispiel ist der Graph mit *minimaler Oberfläche* das Quadrat mit Seitenlängen 3 ($p = 12$). Für jedes n besteht der Graph mit *maximale Oberfläche* aus n disjunkten Quadraten der Seitenlänge und hat die Oberfläche $p = 4n$. Deshalb hat die spontane Magnetisierung m_0 eine (formale) Potenzreihe in ζ . In einer Dimension oder für ein unendlich langes Gitter mit endlicher Breite gilt dies nicht. Es gibt dann Graphen fester Oberfläche mit beliebig großem Volumen.

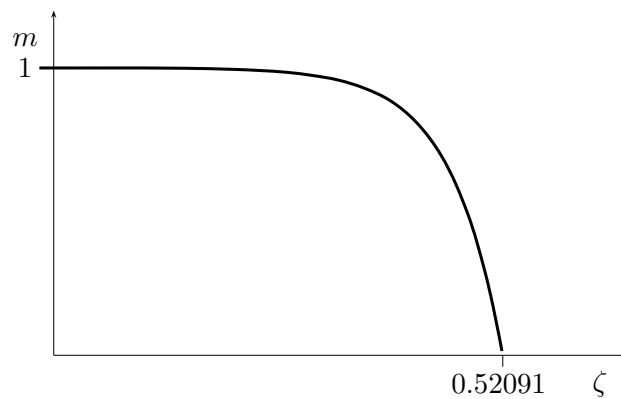
Für das $2d$ quadratische Ising-Modell sind

$$\begin{aligned} g_1 &= \zeta^4 \\ 2g_2 &= 4\zeta^6 - 5\zeta^8 \\ 3g_3 &= 18\zeta^8 - 48\zeta^{10} + 31\zeta^{12} \\ 4g_4 &= 4\zeta^8 + 72\zeta^{10} - 340\zeta^{12} + \dots \\ 5g_5 &= 40\zeta^{10} + 215\zeta^{12} + \dots \\ 6g_6 &= 12\zeta^{10} + 240\zeta^{12} + \dots \\ 7g_7 &= 154\zeta^{12} + \dots \\ 8g_8 &= 48\zeta^{12} + \dots \\ 9g_9 &= 9\zeta^{12} + \dots \end{aligned}$$

Zum Beispiel ist der Koeffizient $31/3$ von ζ^{12} in $g_3(\zeta)$ bestimmt als Koeffizient von V in der Zahl $G_V(3, 12)$ aller Graphen mit Volumen $n(X) = 3$ und Oberfläche $p(X) = 12$. Für die Summe in (9.34) finden wir

$$\sum n g_n(\zeta) = \zeta^4 + 4\zeta^6 + 17\zeta^8 + 38\zeta^{10} + 357\zeta^{12} + \dots \quad (9.35)$$

In der folgenden Abbildung ist die spontane Magnetisierung (9.34) geplottet.



Extrapolation zum kritischen Punkt

Die Extrapolation ergibt eine verschwindende Magnetisierung bei

$$\zeta_c = 0.52091 \quad \text{oder} \quad T_c = 3.06665 \cdot J \sim 0.76666 \cdot T_{\text{MF}}. \quad (9.36)$$

Die Tieftemperaturreihe für die Magnetisierung,

$$m_0 = \sum a_n y^n = 1 - 2y^2 - 8y^3 - 34y^4 - 152y^5 - 714y^6 + \dots, \quad (9.37)$$

mit $y = \zeta^2$ ist, hat bis auf a_0 nur negative Koeffizienten. Falls die Reihe einen endlichen Konvergenzradius y_c hat, so liegt die Singularität von $m_0(y)$ auf der positiven reellen Achse bei y_c . Wir analysieren die Reihe wie früher mit dem Quotientenkriterium.

$$m_0 \sim \left(1 - \frac{y}{y_c}\right)^\beta = \sum a_n y^n \implies \frac{a_n}{a_{n-1}} = \frac{1}{y_c} - \frac{1 + \beta}{y_c} \frac{1}{n}. \quad (9.38)$$

In [43] wurde die Tieftemperaturentwicklung für das 2d-Ising-Modell auf dem quadratischen Gitter bis zur Ordnung y^{76} berechnet. Die Koeffizienten und Koeffizientenquotienten bis zur Ordnung y^{15} sind in der folgenden Tabelle enthalten.

n	a_n	a_n/a_{n-1}	n	a_n	a_n/a_{n-1}	n	a_n	a_n/a_{n-1}
1	9		6	-714	4.69737	11	-2373048	5.22263
2	-2		7	-3472	4.86275	12	-12515634	5.27408
3	-8	4.00000	8	-17318	4.98790	13	-66551016	5.31743
4	-34	4.25000	9	-88048	5.08419	14	-356345666	5.35447
5	-152	4.47059	10	-454378	5.16056	15	-1919453984	5.38649

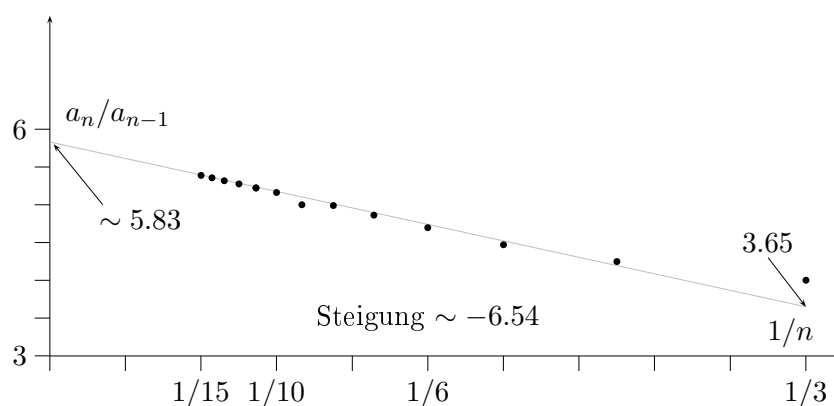
Die Quotienten a_n/a_{n-1} sind in der nächsten Abbildung über n aufgetragen. Die Steigung der interpolierenden Gerade ist etwa -6.54 und der Schnittpunkt mit der Ordinate bei $1/y_c \sim 5.83$. Daraus ergibt sich folgende Schätzung für die kritische Temperatur

$$\frac{1}{y_c} = e^{4\beta_c J} = 5.83 \implies T_c = 2.269 \cdot J = 0.567 \cdot T_{\text{MF}}. \quad (9.39)$$

Dies ist nahe am exakten Wert (9.19). Für den kritischen Koeffizienten β finden wir

$$\beta \sim 6.54/5.83 - 1 \sim 0.122. \quad (9.40)$$

anstelle des exakten Wertes $\beta = 1/8 = 0.125$.



9.3 Aufgaben

Aufgabe 14: Hochtemperaturentwicklung für das 3d-Isingmodell

Untersuchen sie die Graphen für die Hochtemperaturentwicklung der Zustandssumme des 3-dimensionalen Ising-Modells mit

$$H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y \quad \text{mit} \quad s_x, s_y \in \{-1, 1\}.$$

Die Anzahl NN-Paare ist $P = 3N$. Sie sollten folgende Reihe

$$Z = (\cosh K)^{3V} \cdot 2^V \cdot \left(1 + 3Vv^4 + 22Vv^6 + \frac{1}{2} \{9V(V-1) + 375V\} v^8 + \dots \right)$$

mit $v = \tanh(\beta J)$ erhalten. Geben Sie weiterhin für $e^{-\beta f}$ (f ist die Dichte der Freien Energie) die Entwicklung ebenfalls bis zur Ordnung v^8 an.