Institut für Biologische Physik
J. Berg
U. Michel, S. Kleinbölting

1 Landau-Theorie des Ising Ferromagneten (40 P) Wir betrachten einen Ising Ferromagneten bestehend aus N Spins, beschrieben durch den Hamiltonian

$$H = -h \sum_{i=1}^{N} s_i - \frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \in U(i)} s_i s_j$$

wobei wir mit h das externe Feld und mit J die Stärke der Kopplung ($J > 0$ im Ferromagneten) bezeichnen. $U(i)$ bezeichnet die Menge aller Gitterplätze die an i angrenzen. Der Faktor $1/2$ kommt zustande, da jedes Paar von benachbarten Spins zweimal in der Doppelsumme über i, j vorkommt.

Wir betrachten ein symmetrisches Gitter in d-Dimensionen, sodass jeder Spin $z = 2d$ Nachbarn hat.

Um das Modell überhaupt analytisch behandeln zu können, bedienen wir uns einer – zugegebenermaßen recht brachialen – Näherung. Diese Variante der sogenannten *Mean-Field-Näherung*[1] (dt. *Molekularfeldnährung*) geht davon aus, dass

(i) die Erwartungswerte der Spins $\langle s_i \rangle$ aufgrund von Translationssymmetrie des Systems nicht von der Position abhängt: $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle$.

(ii) die *lokale Magnetisierung* m_i ausreichend gut durch die *globale Magnetisierung* m angenähert wird: $m_i \equiv \frac{1}{2d} \sum_{j \in U(i)} s_j \overset{!}{\approx} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} s_j \equiv m$

Die globale Magnetisierung kann auch als Zahl der nach oben zeigenden Spins aufgefasst werden, $m = (N_+ - N_-)/N = 2N_+/N - 1$.

a) (5 P) Zeigen Sie, dass die Hamiltonfunktion pro Spin in Mean-Field-Näherung als Funktion der globalen Magnetisierung durch

$$H/N = -hm - dJm^2$$

gegeben ist.

b) (8 P) Zeigen Sie, dass die Entropie pro Spin $s(m) = S(m)/N$ in Mean-Field-Näherung (in der Stirling-Näherung) gegeben ist durch

$$-s = \left(\frac{1+m}{2}\right) \ln\left(\frac{1+m}{2}\right) + \left(\frac{1-m}{2}\right) \ln\left(\frac{1-m}{2}\right) + \text{const.}$$

Der Ferromagnet befinde sich nun im Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T. Es stellt sich im Gleichgewicht diejenige Magnetisierung $\overline{m}$ ein, die die Gesamtentropie von Magnet und Wärmebad maximiert, bzw. welche die variationelle freie Energie $f(m; T, h) :=$

[1] Diese Näherung findet breite Anwendung in der statistischen Physik und Quantenfeldtheorie. Darüber hinaus wird sie auch ausserhalb der Physik eingesetzt, z.B. zur Beschreibung neuronaler Netzwerke, epidemischer Modelle oder statistischer Inferenzprobleme.

$H(m,h)/N - Ts(m)$ minimiert. Dies definiert uns die Helmholtz freie Energie des Systems im thermodynamischen Gleichgewicht:

$$F(T,h) = \min_m Nf(m;T,h) = Nf(\overline{m};T,h)$$

c) (5 P) Entwickeln Sie nun $f(m;T,h)$ bis zur 4. Ordnung um $m = 0$ und zeigen Sie

$$f(m;T,h) = -hm + \left(-dJ + \frac{T}{2}\right) m^2 + \frac{T}{12} m^4 + \text{const.} \tag{1}$$

Wir betrachten im Folgenden zuerst den Fall $h = 0$.

d) (7 P) Den Phasenübergang erkennen wir daran, dass es für $T > T_c$ nur ein Minimum von (1) gibt und für $T < T_c$ zwei verschiedene. Bestimmen Sie T_c aus (1). Zeichnen Sie als Erklärung $f(m;T,h)$ qualitativ für zwei Temperaturen $T_1 > T_c > T_2$.

e) (7 P) Wir definieren $\Delta T = (T - T_c)/T_c$. Für $T < T_c$ hat (1) Minima bei $\pm\overline{m}$. Zeigen Sie, dass

$$\overline{m} = \sqrt{3\left|\frac{\Delta T}{1 + \Delta T}\right|} \approx \pm\sqrt{3|\Delta T|}\ ,\ \Delta T < 0$$

gilt. Zeichnen Sie die Funktion $\overline{m}(T)$ in der Nähe der kritischen Temperatur.

Um welchen Typ Phasenübergangs handelt es sich?

Wir sehen also, dass in der ferromagnetischen Phase zwei mögliche Gleichgewichte existieren, beschrieben durch $\pm\overline{m}$. In Realität nimmt ein System jedoch nur einen der Werte an. Wie jedoch fällt die Entscheidung für eines der beiden möglich Minima[2]? Schauen wir uns dazu die Suszeptibilität an.

f) (8 P) Genauer gesagt interessiert die Suszeptibilität bei verschwindendem Feld, $\chi = \partial_h \overline{m}|_{h=0}$.

Sei $\overline{m_0}$ eines der Minima von (1) bei $h = 0$ wie oben berechnet. In Anwesenheit eines Feldes, wird das wahre Minimum von $\overline{m_0}$ abweichen. Wir schreiben $\overline{m} = \overline{m_0} + \overline{\delta m}$ und fragen nach dem Wert von $\overline{\delta m}$.

Entwickeln Sie die Ableitung von (1) bis zur ersten Ordnung in $\overline{\delta m}$ und berechnen daraus näherungsweise die Suszeptibilität bei $h = 0$ als Funktion von ΔT.

Können Sie nun erklären wie das System einen der beiden Zustände in der ferromagnetischen Phase auswählt?

Was bedeutet das Verhalten der Suszeptibilität am Phasenübergang für die Fluktuationen von m?

[2] Wir haben hier das einfachste Beispiel für eine sog. *spontane Symmetriebrechung*. Die Hamiltonfunktion ist (in Abwesenheit eines externen Feldes) symmetrisch unter Umkehr der Magnetisierung $m \to -m$. Trotzdem nimmt das System einen der möglichen Zustand ein. Die Symmetrie ist eben gebrochen.