

WINTERSEMESTER 2005/2006
SEMINAR ZUR THEORIE DER TEILCHEN UND FELDER
PROF. MÜNSTER & PROF. PHILIPSEN

DAS ISING-MODELL

Holger Büch

30.11.05

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Ferromagnetismus	2
2.1	Phänomenologie	2
2.2	Mikroskopischer Erklärungsansatz	3
2.3	Der Phasenübergang	3
3	Definition des Ising-Modells	4
3.1	Das Gitter	4
3.2	Wechselwirkungen	4
4	Das eindimensionale Modell	5
4.1	Berechnung der Zustandssumme mit der Transfermatrix-Methode	6
4.2	Korrelation	8
4.3	Thermodynamische Größen	9
4.4	Thermodynamische Resultate	10
4.5	Zusammenfassung	11
5	Lösung des zweidimensionalen Modells	11
6	Resümee und Ausblick	13



Abbildung 1: Ernst Ising (1900-1998) und Lars Onsager (1903-1976)

1 Einleitung

Der Ferromagnetismus ist eines der interessantesten Phänomene in der Festkörperphysik. Neben vielen anderen beschäftigte sich auch Wilhelm Lenz Anfang der 1920er Jahre mit der Frage, wie man ihn mikroskopisch beschreiben kann. Er beauftragte seinen Studenten Ernst Ising mit der Aufgabe, diese seine Idee mathematisch auszuarbeiten. Ising publizierte 1925 eine exakte Lösung des eindimensionalen Modells. Erst 1944 löste der Norwege Lars Onsager das zweidimensionale Modell exakt (ohne äußeres Magnetfeld) mit dem Konzept der Transfermatrix. Das Ising-Modell ist bis heute das einzige halbwegs realistische Modell, das in der statistischen Physik exakt behandelt werden kann und dabei in zwei oder mehr Dimensionen einen **Phasenübergang zeigt**. Hier wird die Lösung des eindimensionalen Modells hergeleitet und die des zweidimensionalen angegeben und diskutiert.

2 Ferromagnetismus

2.1 Phänomenologie

Schon 1823 erkannte Ampère, wie Eisen Magnetfelder seltsam beeinflusst. Nur noch wenige andere Stoffe wie Kobalt, Nickel, Gadolinium und Europiumoxid zeigen Ferromagnetismus, dessen Phänomene man in der Beschreibung der Hystereseurve zusammenfassen kann. Wie in Abb. 2 zu sehen, durchläuft die Magnetisierung eines unmagnetisierten ferromagnetischen Stoffes zunächst die Neukurve (a), wenn ein äußeres Magnetfeld angelegt wird.

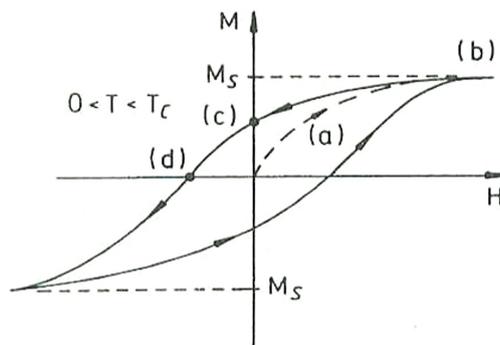


Abbildung 2: Hysterese

Die Magnetisierung nimmt bis zur Sättigung (b) zu. Wird das Magnetfeld jedoch wieder abgeschaltet, bleibt eine Restmagnetisierung zurück, was einen Permanentmagneten (c) definiert. Nun muss erst ein entgegengerichtetes Koerzitivmagnetfeld (d) angelegt werden, um die Magnetisierung wieder aufzuheben. Man beobachtet, dass oberhalb einer kritischen Temperatur, der so genannten Curie-Temperatur T_C (typischerweise etwa 1000 K), kein Ferro- sondern nur noch Paramagnetismus zu beobachten ist.

2.2 Mikroskopischer Erklärungsansatz

Ebenso wie beim Paramagnetismus bedarf es zum Ferromagnetismus dem Vorhandensein permanenter magnetischer Dipole im Festkörper. Der Unterschied ist jedoch, dass hier nun diese Dipole sich in so genannten Weißschen Bezirken (siehe Abb. 3) spontan gleich ausrichten. Ein äußeres Magnetfeld bewirkt nun eine Ausrichtung dieser Weißsche Bezirke, wobei die thermische Bewegung dieser Tendenz entgegen wirkt. Innerhalb der Bezirke bleibt aufgrund quantenmechanischer Wechselwirkung die Ausrichtung jedoch erhalten, bis die Temperatur T_C erreicht wird.

2.3 Der Phasenübergang

Der Ferromagnetismus soll nun in die an anderer Stelle eingeführten Definitionen und Begriffe eingeordnet werden. So findet in ferromagnetischen Stoffen beim Erreichen der Curie-

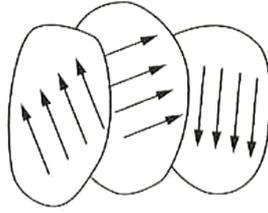


Abbildung 3: Ferromagnetismus

Temperatur ein Phasenübergang 2. Ordnung statt. Der Ordnungsparameter ist die spontane Magnetisierung, was dem spontanen magnetischen Moment pro Volumen entspricht. Damit ist eine vorhandene Magnetisierung bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfelds gemeint. Zudem macht man die Beobachtung, dass die magnetische Suszeptibilität χ divergiert, wenn die kritische Temperatur erreicht wird.

3 Definition des Ising-Modells

3.1 Das Gitter

Das Ising-Modell konstruiert ein d -dimensionales periodisches Gitter. An jedem Gitterpunkt sitzt ein magnetisches Moment μ , das zwei mögliche Ausrichtungen bezüglich einer vorgegebenden Bezugsachse hat: nach oben oder nach unten. Dieses Moment kann somit durch die klassische Spinvariable $S_i = \pm 1$ (Ising-Spin) beschrieben werden.

Die gesamte Systemkonfiguration wird durch den Satz von Zahlen $\{S_i\}$ definiert. Es gibt 2^N verschiedene Systemkonfigurationen bei N Teilchen. Es gibt keine anderen Variablen.

3.2 Wechselwirkungen

Das äußere Magnetfeld B_0 und die Temperatur T sind äußere, vorgegebene Parameter. Jeder Spin wechselwirkt mit dem äußeren Magnetfeld B_0 und jeder Spin wechselwirkt mit seinen nächsten Nachbarn mit der Kopplungskonstante J/μ^2 . Hier werden isotrope Kopplungskonstanten angenommen, so dass J bei jedem Nachbarpaar gleich ist.

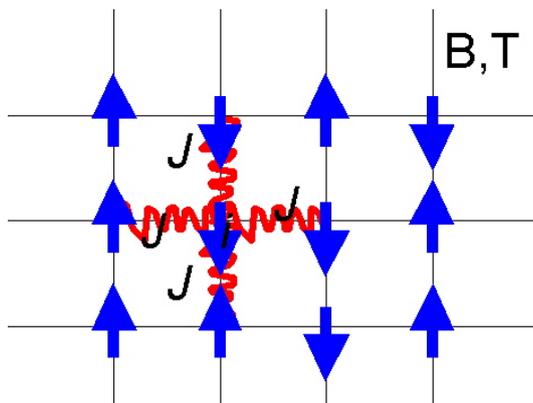


Abbildung 4: Wechselwirkung

Das System wird nun beschrieben durch die **Hamiltonfunktion**:

$$H_{\{S_i\}} = -J \sum_{i,j} S_i S_j - \mu B_0 \sum_i S_i \quad (1)$$

$\sum_{i,j}$ enthält $\frac{\gamma N}{2}$ Terme, γ ist Anzahl der nächsten Nachbarn eines jeden Gitterpunkts, z.B.:

$$\gamma = \begin{cases} 2 & \text{eindimensionale Kette} \\ 4 & \text{zweidimensionales quadratisches Gitter} \\ 6 & \text{dreidimensionales einfaches kubisches Gitter} \\ 8 & \text{dreidimensionales raumzentriertes kubisches Gitter} \end{cases}$$

4 Das eindimensionale Modell



Abbildung 5: Spinkette

Zunächst muss die kanonische Zustandssumme berechnet werden, aus der wir dann alle

thermodynamischen Größen ableiten können:

$$Z(T, B_0) = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H_{\{S_i\}}} \quad (2)$$

$$= \sum_{\{S_i\}} \exp \left[-\beta \left(-J \sum_{i,j} S_i S_j - \mu B_0 \sum_i S_i \right) \right] \quad (3)$$

Die Berechnung der Zustandssumme wird mit der Idee der Transfermatrix durchgeführt. Ising selbst fand eine andere Lösung, doch soll hier dieser elegante Weg beschrieben werden, mit dem Onsager die Lösung des zweidimensionalen Modells gelang.

4.1 Berechnung der Zustandssumme mit der Transfermatrix-Methode

Zunächst wird die Hamiltonfunktion (1) in eine äquivalente Form gebracht:

$$\beta H = -j \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - b \sum_{i=1}^N S_i. \quad (4)$$

Dabei ist $j \equiv \beta J$ und $b \equiv \beta \mu B_0$. Wir nehmen nun periodische Randbedingungen an: $S_{N+1} = S_1$. Bei großer Spinzahl N ist diese Annahme keine große Einschränkung des Modells.

Nun wird die Funktion $T_{i,j}$ definiert zu

$$T_{i,i+1} = \exp \left\{ j S_i S_{i+1} + \frac{1}{2} b (S_i + S_{i+1}) \right\}. \quad (5)$$

Die periodischen Randbedingungen ausnutzend erkennt man den Zusammenhang

$$e^{-\beta H} = T_{1,2} T_{2,3} \cdots T_{N,1}. \quad (6)$$

Offensichtlich gibt es vier mögliche Werte für $T_{i,i+1}$. Wir wollen nun in die Diracschreibweise übergehen und definieren dazu die Bra-Zustände:

$$|S_i = 1 \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$|S_i = -1 \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

In dieser Basis können wir die Transfermatrix T angeben, so dass

$$\langle S_i | T | S_{i+1} \rangle = T_{i,i+1} \quad (9)$$

gilt. Die Transfermatrix muss somit

$$T = \begin{pmatrix} e^{j+b} & e^{-j} \\ e^{-j} & e^{j-b} \end{pmatrix} \quad (10)$$

lauten.

(9) benutzen wir in der Zustandssumme:

$$\sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H_{\{S_i\}}} = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} \langle S_1 | T | S_2 \rangle \langle S_2 | T | S_3 \rangle \cdots \langle S_N | T | S_1 \rangle \quad (11)$$

$$= \sum_{S_1} \langle S_1 | T^N | S_1 \rangle = \text{Spur } T^N \quad (12)$$

Dabei haben wir die Vollständigkeit der Spinzustände ausgenutzt:

$$\sum_{S_i} |S_i \rangle \langle S_i| = 1. \quad (13)$$

So bleibt die Berechnung der Spur der Transfermatrix. In ihrer Eigenbasis ist dies gerade die Summe der Eigenwerte in der Potenz N . Diese sind einfach zu berechnen mit der Bedingung:

$$\det(T - E_i E) = 0. \quad (14)$$

E ist die dreidimensionale Einheitsmatrix, E_i sind die Eigenwerte. Das Ergebnis ist:

$$E_{\pm} = e^j \left[\cosh b \pm \sqrt{\cosh^2 b - 2e^{-ej} \sinh(2j)} \right]. \quad (15)$$

E_- ist kleiner als E_+ . Stellt man die Zustandssumme um,

$$Z_N(T, B_0) = E_+^N \left[1 + \left(\frac{E_-}{E_+} \right)^N \right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} E_+, \quad (16)$$

erkennt man, dass im thermodynamischen Limes E_- vernachlässigt werden kann.

Schaltet man nun das äußere Magnetfeld ab ($B_0 = 0$), so bleibt:

$$E_{\pm} = e^j \pm e^{-j}. \quad (17)$$

Für die Zustandssumme bedeutet das:

$$Z_N(T, 0) = 2^N \cosh^n(\beta J) [1 + \tanh^N(\beta J)] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 2^N \cosh^N(\beta J). \quad (18)$$

Mit diesem Ergebnis kann nun die thermodynamische Diskussion begonnen werden.

4.2 Korrelation

Die Korrelationsfunktion ist ein Maß für die Korrelation zwischen zwei Orten bezüglich der Eigenschaft X , dabei ist $x(\vec{r})$ die Dichte der Größe X :

$$g(\vec{r}, \vec{r}') = \langle x(\vec{r})x(\vec{r}') \rangle - \langle x(\vec{r}) \rangle \langle x(\vec{r}') \rangle \quad (19)$$

Im Ising-Modell ist einzusetzen:

- $X = m = \mu \sum_i S_i$ (magnetisches Gesamtmoment)
- $x(\vec{r}) = S_i$ (Ising-Spin)

Somit erhält man als Korrelationsfunktion für das Ising-Modell:

$$g_{i,j} = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \quad (20)$$

Nun soll der Mittelwert des Spinprodukts $\langle S_i S_j \rangle$ berechnet werden. Dies kann mit der kanonischen Zustandssumme für $B_0 = 0$ gemacht werden,

$$Z_N(T, 0) = 2^N \prod_{i=1}^N \cosh^N(\beta J_i)$$

da ein äußeres Magnetfeld hierauf keinen Einfluss haben sollte. Der Mittelwert wird wie gewöhnlich im kanonischen Ensemble ermittelt:

$$\begin{aligned}
\langle S_i S_{i+j} \rangle &= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{S_i\}} (S_i S_{i+j}) \exp \left[\sum_{m=1}^N J_m S_m S_{m+1} \right] \\
&= \frac{1}{Z_N} \sum_{\{S_i\}} (S_i S_{i+1}) (S_{i+1} S_{i+2}) \cdots (S_{i+j-1} S_{i+j}) \exp \left[\sum_{m=1}^N J_m S_m S_{m+1} \right] \\
&= \frac{1}{Z_N} \left(\sum_{k=i}^{i+j-1} \frac{\partial}{\partial j_k} \right) Z_N \\
&= \frac{\cosh j_1 \cdots \cosh j_{i-1} \sinh j_i \cdots \sinh j_{i+j-1} \cosh j_{i+j} \cdots \cosh j_N}{\prod_{k=1}^N \cosh j_k} \\
&= \prod_{k=1}^j \tanh(\beta J_{i+k-1}) \\
&\longrightarrow \tanh^j(\beta J).
\end{aligned}$$

Dabei werden zunächst verschiedene Kopplungsgrößen J_m angenommen, um einen Ableitungstrick anwenden zu können. Am Ende geht man wieder zu $J_m = J \forall m$.

Dieses Ergebnis ist erstaunlich. Trotz der Wechselwirkung nur mit den direkten Nachbarn gibt es eine langweitrreichige Korrelation zwischen den Ising-Spins, die nur vom Abstand j der Spins voneinander abhängig ist.

4.3 Thermodynamische Größen

Nun werden noch die zu diskutierenden thermodynamischen Größen zusammengestellt. Wie oben berechnet man das mittlere magnetische Moment (Magnetisierung) im kanonischen Ensemble, diesmal jedoch mit der Zustandssumme für $B_0 \neq 0$:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{S_i\}} \left[\left(\mu \sum_i S_i \right) \exp \left(\beta J \sum_{i,j} S_i S_j + \beta \mu B_0 \sum_i S_i \right) \right] \quad (21)$$

$$= \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial}{\partial B_0} \ln Z_N(T, B_0) \right)_T = M(T, B_0). \quad (22)$$

Für die Magnetische Suszeptibilität gilt

$$\chi = \mu_0 \left(\frac{\partial \langle m \rangle}{\partial B_0} \right)_T. \quad (23)$$

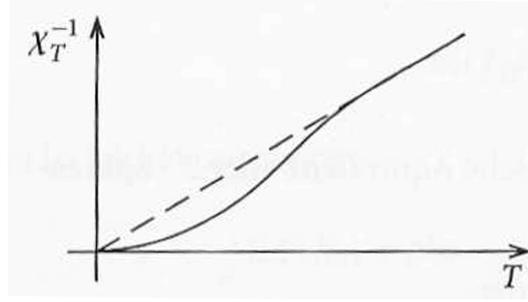


Abbildung 6: Temperaturverlauf der inversen isothermen Suszeptibilität

Mit (20), (22) und (23) erhält man das **Dissipations-Fluktuations-Theorem**

$$\chi = \beta\mu^2 \frac{\mu_0}{V} \sum_{i,j} g_{i,j}. \quad (24)$$

4.4 Thermodynamische Resultate

Nun können wir das Ergebnis (18) in die zusammengestellten Formeln einsetzen.

Man bekommt die magnetische Suszeptibilität mit dem Dissipations-Fluktuations-Theorem (24):

$$\begin{aligned} \chi(B_0 = 0) &= \beta\mu^2 \frac{\mu_0}{V} \sum_{i,j} g_{i,j} \\ &= \beta\mu^2 \sum_{i,j} (\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) \\ &= \beta\mu^2 \mu_0 \sum_j \tanh^j(\beta J) \\ &= \frac{\beta\mu^2 \mu_0}{1 - \tanh(\beta J)} \end{aligned}$$

Eine graphische Auswertung (siehe Abb. 6) zeigt keine Divergenz der Suszeptibilität irgendwo, sondern einen Verlauf wie beim Paramagnetismus. Für hohe Temperaturen ist das Curie-Gesetz erfüllt:

$$\chi = \frac{C}{T}.$$

Für die Magnetisierung erhält man mit (22):

$$M(T, B_0) = N\mu \frac{\sinh(\beta\mu B_0)}{\sqrt{\cosh^2(\beta\mu B_0) - 2e^{-2\beta J} \sinh(2\beta J)}} \quad (25)$$

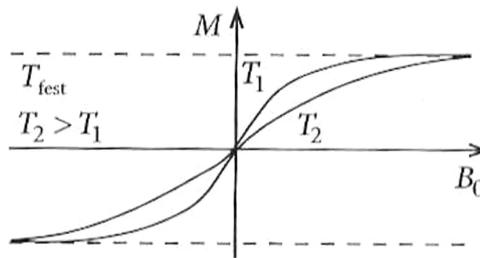


Abbildung 7: Isothermen des eindimensionalen Modells

$$\Rightarrow M(T, 0) = 0 \quad \forall T.$$

Somit gibt es keine spontane Magnetisierung, wie auch Abb. 7 zeigt.

4.5 Zusammenfassung

Es gibt keinen Phasenübergang im eindimensionalen Ising-Modell (bei endlichen Temperaturen). Die Tendenz zur Ausrichtung ist zu schwach, da es zu wenige direkte Nachbarn gibt.

5 Lösung des zweidimensionalen Modells

In diesem Abschnitt wird die Lösung im zweidimensionalen angegeben und kurz diskutiert, da erst hier ein Phasenübergang beschrieben wird. Es wird nicht der Anspruch einer zufriedenstellenden Erklärung erhoben. Wie im eindimensionalen Fall ist die kanonische Zustandssumme zu berechnen, bei nun vier direkten Nachbarn ist diese Berechnung jedoch weit komplizierter. Onsager gelang die Berechnung 1944 ohne eingeschaltetes äußeres Feld mit dem Konzept der Transfermatrix.

Glasser fand 1970 einen anschaulichen graphischen Lösungsweg. Die Lösung lautet:

$$Z_N(T) = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \left[\prod_{q_1, q_2} \left\{ (1 + v^2)^2 - 2v(1 - v^2)(\cos q_1 + \cos q_2) \right\} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (26)$$

Mit $v = \tanh(\beta J)$, q_1 und q_2 sind Variablen aus der Herleitung mit $q_i = \frac{2\pi}{N_i}(1, 2, \dots, N_i)$.

Ein Phasenübergang tritt nun auf, wenn eine Ableitung eines thermodynamischen Potentials eine Unstetigkeit aufweist. So wird aus (26) die freie Energie $f(T)$ pro Spin im thermodynamischen Limes berechnet zu:

$$f(T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} (-\beta^{-1} T \ln Z_N(T)) \quad (27)$$

$$= -\beta^{-1} \left\{ \ln 2 + \frac{1}{8\pi^2} \iint_0^{2\pi} dq_1 dq_2 \ln [(1 - \sinh(2\beta J))^2 \right. \quad (28)$$

$$\left. + \sinh(2\beta J) (2 - \cos q_1 - \cos q_2) \right\}. \quad (29)$$

Etwas Auffälliges ist zu erwarten, wenn das Argument des \ln verschwindet. Mit einer der Bedingungen hierfür kann eine Gleichung für die kritische Temperatur gefunden werden:

$$\sinh \frac{2J}{kT_C} = 1.$$

Macht man nun eine Taylor-Entwicklung um T_C nach Potenzen von $T - T_C$ so erhält man

$$f(T) \approx a - b(T - T_C)^2 \ln |T - T_C|$$

mit gewissen Größen a und b .

Für die Wärmekapazität

$$C_{B_0=0} = -T \frac{d^2 f}{dT^2} \sim \ln |T - T_C|$$

erhält man tatsächlich eine Divergenz.

Die Magnetisierungsberechnung wie im eindimensionalen mittels $M(T, B_0) = \beta^{-1} \frac{\partial}{\partial B_0} \ln Z$ ist nicht möglich, da wir ja nur die Lösung für $B_0 = 0$ haben.

Sie kann jedoch mit Hilfe von

$$M_S(T) = \mu \langle S \rangle \quad (30)$$

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle \longrightarrow \langle S_i \rangle \langle S_{i+j} \rangle = \langle S \rangle^2 \text{ im thermodynamischen Limes} \quad (31)$$

$$M_S^2(T) = \mu^2 \lim_{j \rightarrow \infty} \langle S_i S_{i+j} \rangle \quad (32)$$

berechnet werden, was erstmals Yang 1952 gelang:

$$M_S(T) = \begin{cases} (1 - \sinh^{-4}(2\beta J))^{\frac{1}{8}} & \text{für } T < T_C \\ 0 & \text{für } T > T_C \end{cases} \quad (33)$$

Es gibt also einen Phasenübergang bei T_C , denn unterhalb dieser Temperatur und nur dort gibt es eine spontane Magnetisierung.

Weiter liest man den kritischen Exponenten des Ordnungsparameters zu $\beta = \frac{1}{8}$ ab.

6 Resümee und Ausblick

Das Ising-Modell beschreibt einen Phasenübergang im zwei- und auch höherdimensionalen Modell. Bislang ist es nur in einer und in zwei Dimensionen bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes exakt gelöst. Exakt heißt hier, dass die Zustandssumme genau berechnet werden kann. Für drei Dimensionen gibt es derart gute Näherungsmethoden, so dass keine neuen Erkenntnisse für den Fall erwartet werden, dass das $3d$ -Modell doch mal exakt gelöst werden sollte.

Die größte Einschränkung des Modells liegt in der Beschränkung auf nur zwei Spinrichtungen, was in realistischen Ferromagneten nicht gegeben ist, weshalb das Modell heute kaum mehr zur Untersuchung des realistischen Ferromagnetismus genutzt wird. Erweiterungen des Modells auf mehrere Richtungen (z.B. Heisenbergmodell) haben die Unlösbarkeit (exakt) zum Preis.

Dennoch ist das Ising-Modell sehr beliebt. Es ist wegen der Möglichkeit der exakten Berechnung der Zustandssumme ein allgemeines Demonstrationsmodell der statistischen Physik, dass auch auf ähnliche Problemstellungen übertragen werden kann. So kann etwa eine Äquivalenz zum Gittergasmodell hergestellt werden, indem jeder Gitterpunkt den Wert 1 bei An- und 0 bei Abwesenheit eines Gasteilchens annimmt und nirgendwo sonst Teilchen erlaubt sind.