Ising-Modell III: Onsager-Lösung in zwei Dimensionen

Jörg Wassenberg

20. Dezember 2000

Gegeben sei ein System aus $N_x N_y = N$ Spins $S_i = \pm 1$ auf einem rechteckigen Gitter. Direkt benachbarte Spins sollen miteinander wechselwirken. Ein äußeres Magnetfeld sei nicht vorhanden. Die Hamilton-Funktion des Systems lautet

$$H = -J \sum_{\{i,j\}}^{n.N.} S_i S_j \tag{1}$$

Die Spins S_i werden als klassische Variable behandelt. Wir beschränken uns auf Ferromagnetismus, d.h. $J > 0$. Summiert wird über alle Paare nächster Nachbarn („n.N.“), deren Anzahl bei Vernachlässigung von Randeffekten $2N$ beträgt.

In diesem Vortrag soll die Frage nach der Existenz eines Phasenübergangs untersucht werden. Dazu wird zunächst die kanonische Zustandssumme $Z_N(T)$ berechnet, aus der sich alle thermodynamischen Größen ableiten lassen. Onsager hat das Problem ursprünglich mit Hilfe der Transfermatrixmethode gelöst; wir verwenden hier eine Graphen-Methode.

1 Berechnung der kanonischen Zustandssumme

In diesem Abschnitt berechnen wir die kanonische Zustandssumme $Z_N(T)$ des durch die Hamilton-Funktion (1) beschriebenen Systems.

$$Z_N(T) = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_i\}} \prod_{\{i,j\}}^{n.N.} e^{\beta J S_i S_j} \quad \text{mit } \beta = \frac{1}{k_B T} \tag{2}$$

Die Summe erstreckt sich über die Menge $\{S_i\}$ aller 2^N Spinkonfigurationen. Für die Exponentialfunktion in (2) können wir schreiben

$$e^{\beta J S_i S_j} = \cosh(\beta J) + S_i S_j \sinh(\beta J) = \cosh(\beta J)\,[1 + S_i S_j \tanh(\beta J)] \tag{3}$$

wobei wir $S_i S_j = \pm 1$ benutzt haben. Führen wir noch die Abkürzung

$$v := \tanh(\beta J) \tag{4}$$

ein, so erhalten wir durch Einsetzen von (3) in (2)

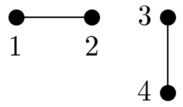
$$
\begin{aligned}
Z_N(T) &= \cosh^{2N}(\beta J) \sum_{\{S_i\}} \prod_{\{i,j\}}^{n.N.} (1 + v S_i S_j) \\
&= \cosh^{2N}(\beta J) \sum_{\{S_i\}} \left[1 + v \sum_{\nu=1}^{2N} S_{i_\nu} S_{j_\nu} + v^2 \sum_{\substack{\nu,\mu=1 \\ \nu \neq \mu}}^{2N} (S_{i_\nu} S_{j_\nu})(S_{i_\mu} S_{j_\mu}) + \dots \right] \qquad (5)
\end{aligned}
$$

1.1 Graphische Interpretation

Einen Summanden in (5) der Form

$$
v^l (S_{i_1} S_{j_1}) \cdots (S_{i_l} S_{j_l}) \qquad (6)
$$

interpretieren wir jetzt als Diagramm aus l Linien zwischen benachbarten Gitterplätzen (*Vertices*). Ein Faktor v entspricht dabei einer Linie, ein S_i einem Vertex.



$$
\Leftrightarrow \qquad v^2 (S_1 S_2)(S_3 S_4)
$$

Man kann sich klarmachen, daß alle denkbaren Diagramme in der Summe in der eckigen Klammer in (5) enthalten sind. Wir führen noch die Summation über alle Spinkonfigurationen $\{S_i\}$ durch:

$$
v^l \sum_{\{S_i\}} (S_{i_1} S_{j_1}) \cdots (S_{i_l} S_{j_l}) \qquad (7)
$$

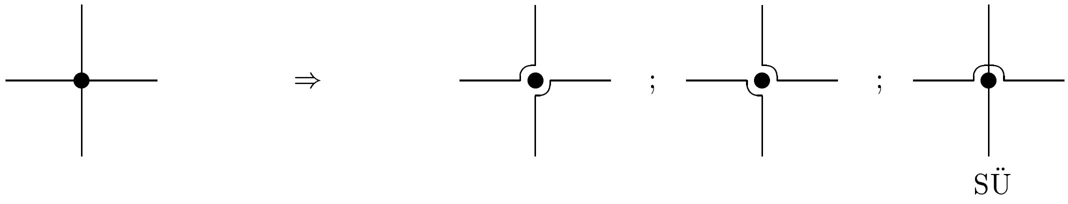
Die Summe verschwindet, wenn mindestens ein Spin in ungerader Potenz auftritt, denn dann gibt es zu jedem Summanden genau einen, der sich nur im Wert dieses Spins vom ersten unterscheidet. Auf Grund der ungeraden Potenz heben sich beide Summanden gegenseitig weg. Es liefern also nur die Diagramme einen Beitrag zur Zustandssumme, in denen alle Vertices in gerader Ordnung (0, 2 oder 4 mal) vorkommen. Es handelt sich dabei gerade um die Diagramme, die geschlossene Linienzüge repräsentieren. Die Summation über $\{S_i\}$ in (7) ergibt demnach 2^N. Somit erhalten wir für (5)

$$
Z_N(T) = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \sum_{l=0}^{\infty} g_l v^l \qquad (8)
$$

Da in der eckigen Klammer in (5) über alle Diagramme summiert wird, ist g_l die Zahl der Diagramme aus l Linien mit ausschließlich geraden Vertices, $g_0 := 1$.

1.2 Schlaufen

Im nächsten Schritt versuchen wir, g_l durch die Zahl aller in einem Diagramm enthaltenen *Schlaufen* (d.h. geschlossenen Linienzügen) auszudrücken. Es wird sich zeigen, daß sich deren Anzahl leichter ermitteln läßt als die der ursprünglichen Diagramme. Um ein Diagramm in eine Familie von Schlaufen zu überführen, müssen die Vertices vierter Ordnung (die sog. *Knoten*) aufgelöst werden. Es gibt drei Möglichkeiten, einen Knoten aufzulösen, eine davon wird als Selbstüberschneidung (SÜ) bezeichnet. Ein Diagramm mit k Knoten zerfällt somit in 3^k Schlaufenfamilien.



Damit der bei Abzählung der Schlaufenfamilien dasselbe Ergebnis herauskommt wie bei der Abzählung der ursprünglichen Diagramme, werden die Schlaufenfamilien mit Gewichtsfaktoren η versehen, die dafür sorgen, daß die Summe über alle aus einem Diagramm entstehenden Schlaufenfamilien gleich Eins ist:

$$\eta(Familie) := (-1)^{S\ddot{U}(Familie)} \tag{9}$$

Hier ist SÜ(Familie) die Anzahl der Selbstüberschneidungen in der Schlaufenfamilie. Wir überzeugen uns, daß das Gesamtgewicht aller aus einem Diagramm entstehenden Schlaufenfamilien gleich Eins ist:

$$\sum \eta = \sum_{j=0}^{k} \binom{k}{j} 2^{k-j} (-1)^j = (2-1)^k = 1 \tag{10}$$

Es gibt $\binom{k}{j}$ Möglichkeiten, j von k Knoten mit Selbstüberschneidung aufzulösen. Das Gewicht der zugehörigen Schlaufenfamilie beträgt $(-1)^j$. Für die restlichen $k-j$ Knoten gibt es 2^{k-j} Möglichkeiten der Auflösung. Nach Summation über alle j kann die binomische Formel verwendet werden. Also ist das Gesamtgewicht aller Schlaufenfamilien gleich Eins. Wir können deshalb die in (8) auftretende Größe g_l als Summe der Gewichte aller Schlaufenfamilien, die aus l Linien bestehen, interpretieren.

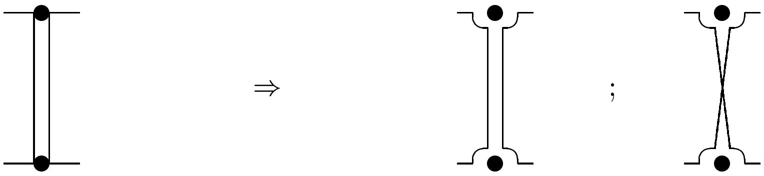
Wir definieren eine neue Größe D_l als Summe der Gewichte aller Schlaufen aus l Linien und drücken g_l durch D_l aus:

$$g_l = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{l_1,\ldots,l_n \\ \sum l_i = l}} D_{l_1} \cdots D_{l_n} \quad \text{für } l \neq 0 \tag{11}$$

Durch das Produkt $D_{l_1} \cdots D_{l_n}$ werden alle möglichen Zerlegungen des Diagramms in n Schlaufen erfaßt, wobei l_i die Anzahl der Linien der i-ten Schlaufe ist. Damit alle Diagramme berücksichtigt werden, muß über die l_i unter Einhaltung der Nebenbedingung $\sum l_i = l$ summiert werden. Daß eine Umindizierung der n Schlaufen nicht auf neue Diagramme führt, wird durch den Faktor

$1/n!$ berücksichtigt. Schließlich wird noch über alle n summiert. Die Summe kann formal bis unendlich laufen, da für genügend große n zwangsläufig ein l_i kleiner als 4 ist. Da es keine Schlaufen aus weniger als 4 Linien gibt, verschwindet das zugehörige D_{l_i} und damit der ganze Summand.

Es ergibt sich das Problem, daß in (11) Mehrfachbelegungen auftreten, d.h. einzelne Linien sind Bestandteil mehrerer Schlaufen. Man kann dieses Problem lösen, indem man vereinbart, eine Doppelbelegung auf zwei verschiedene Weisen aufzulösen, einmal mit und einmal ohne Selbstüberschneidung. Die zugehörigen Gewichte heben sich gegenseitig weg, so daß die Schlaufenfamilien mit Mehrfachbelegung keinen Beitrag zu (11) leisten, wie es auch sein soll.



Für (8) wird $\sum g_l v^l$ benötigt:

$$g_l v^l = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{l_1,\ldots,l_n \\ \sum l_i = l}} \left(D_{l_1} v^{l_1}\right) \cdots \left(D_{l_n} v^{l_n}\right) \quad \text{für } l \neq 0 \tag{12}$$

Durch Summation über l werden alle l_i-Summen voneinander unabhängig:

$$\sum_{l=0}^{\infty} g_l v^l = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_{l=1}^{\infty} D_l v^l \right)^n = \exp\left(\sum_{l=1}^{\infty} D_l v^l \right) \tag{13}$$

Wir erhalten als Zwischenergebnis für die Zustandssumme

$$Z_N(T) = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \exp\left(\sum_{l=1}^{\infty} D_l v^l \right) \tag{14}$$

1.3 Gerichtete Wege

Die verbleibende Aufgabe besteht in der Berechnung der Größe D_l, die als Summe der Gewichte aller Schlaufen aus l Linien definiert war. Dies läßt sich durch Einführung gerichteter Wege bewerkstelligen, denen ebenfalls Gewichte zugeordnet werden können.

Es ist zweckmäßig, die Gitterpunkte in der komplexen Zahlenebene darzustellen:

$$z := x + iy \quad \text{mit } x = 1, ..., N_x \,,\; y = 1, ..., N_y \tag{15}$$

Wir führen 4 *Richtungen* α ein

$$\alpha = 1, i, -1, -i \tag{16}$$

so daß ein Schritt vom Punkt z in Richtung α zum Punkt $z' = z+\alpha$ führt. Desweiteren definieren wir einen *Einzelschritt* p

$$p := (z, \alpha) \tag{17}$$

der aus einem Ausgangspunkt z und einer Richtung α besteht. Schließlich wird ein *Weg* von z_0 nach z_l in l Schritten definiert als eine Folge von $l+1$ Einzelschritten $p_0, ..., p_l$. Man beachte, daß der letzte Einzelschritt $p_l = (z_l, \alpha_l)$ neben dem Endpunkt z_l auch eine Richtung α_l enthält, obwohl der Punkt z_l nicht mehr verlassen wird.

Um Umkehrpunkte auszuschließen, die zu Vertices ungerader Ordnung führen würden, fordern wir

$$\alpha_{j+1} \neq -\alpha_j \tag{18}$$

Einem Weg läßt sich folgendermaßen ein Gewicht zuordnen:

$$\eta(Weg) := e^{i\frac{\varphi}{2}} \quad \text{mit } \varphi := \sum_{j=1}^{l-1} \arg \frac{\alpha_{j+1}}{\alpha_j} \text{ und } \arg \frac{\alpha_{j+1}}{\alpha_j} \in \left\{0, \pm\frac{\pi}{2}\right\} \tag{19}$$

φ ist also der gesamte Drehwinkel beim Durchlaufen des Weges. Es stellt sich die Frage, welcher Zusammenhang zwischen dem Gewicht eines Weges und dem Gewicht einer durch den Weg repräsentierten Schlaufe besteht. Wir zeigen, daß beide bis auf das Vorzeichen übereinstimmen:

- Bei einer Schlaufe ohne SÜ ist der gesamte Drehwinkel $\varphi = \pm 2\pi$.
- Hinzufügen einer SÜ erhöht oder erniedrigt φ um 2π.
- Jede weitere SÜ ändert den Drehwinkel um $\pm 2\pi$.
- Folglich ist bei einer *geraden* Anzahl SÜ φ ein *ungerades* Vielfaches von 2π.
- Entsprechend ist bei einer *ungeraden* Anzahl SÜ φ ein *gerades* Vielfaches von 2π.
- Das Gewicht eines die Schlaufe repräsentierenden Weges ist also $\eta(Weg) = e^{i\frac{\varphi}{2}} = \mp 1$ für eine gerade bzw. ungerade Anzahl SÜ.
- Der Vergleich mit (9) ergibt schließlich

$$\eta(Schlaufe) = (-1)^{SÜ} = -\eta(Weg) \tag{20}$$

1.4 Gewicht eines Weges

In diesem Unterabschnitt soll das Gewicht η eines geschlossenen Weges berechnet werden. Dazu führen wir eine $4N \times 4N$-Matrix M_l ein, deren Matrixelemente $\langle p\,|M_l|\,p'\rangle$ definiert sind als Summe der Gewichte aller Wege von p nach p' in l Schritten. Falls p' von p nicht in l Schritten erreichbar ist, sei $\langle p\,|M_l|\,p'\rangle = 0$.

Da man einen Weg von p nach p' in l Schritten in zwei Wege von p nach p'' in l_1 und von p'' nach p' in l_2 Schritten ($l = l_1 + l_2$) zerlegen kann, gilt

$$\begin{aligned}\langle p\,|M_l|\,p'\rangle &= \sum_{p''} \langle p\,|M_{l_1}|\,p''\rangle \langle p''\,|M_{l_2}|\,p'\rangle \\ &= \langle p\,|M_{l_1} M_{l_2}|\,p'\rangle \qquad (21)\end{aligned}$$

Durch Rekursion erhält man schließlich

$$M_l = {M_1}^l \qquad (22)$$

Jetzt sind wir in der Lage, D_l durch M_1 auszudrücken:

$$\begin{aligned}D_l &= -\frac{1}{2l} \sum_p \langle p\,|M_l|\,p\rangle \\ &= -\frac{1}{2l} \,\mathrm{Sp}\left({M_1}^l\right) \\ &= -\frac{1}{2l} \sum_{j=1}^{4N} {m_j}^l \qquad (23)\end{aligned}$$

m_j sind die Eigenwerte von M_1, deren Existenz wir postulieren. Da bei geschlossenen Wegen Anfangs- und Endpunkte übereinstimmen, interessieren nur die Matrixelemente mit $p = p'$. D_l stellt eine Summe über *alle* Schlaufen aus l Linien dar, folglich muß auch über alle Anfangspunkte p summiert werden. Da eine Änderung des Ausgangspunktes innerhalb einer Schlaufe ebenso wie die Umkehrung des Umlaufsinns zwar zu einem neuen Weg, nicht aber zu einer neuen Schlaufe führt, muß noch durch $2l$ dividiert werden. Das Minuszeichen kommt von (20).

Jetzt kann $\sum D_l v^l$ in (14) berechnet werden,

$$\begin{aligned}\sum_{l=1}^{\infty} D_l v^l &= -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{4N} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(m_j v)^l}{l} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{4N} \ln(1 - v m_j) \\ &= \ln\left(\prod_{j=1}^{4N} \sqrt{1 - v m_j}\right) \\ &= \ln \sqrt{\det(1 - v M_1)} \qquad (24)\end{aligned}$$

wobei die Reihendarstellung des Logarithmus verwendet wurde. Einsetzen in (14) ergibt ein weiteres Zwischenergebnis für die Zustandssumme.

$$Z_N(T) = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \sqrt{\det(1 - v M_1)} \qquad (25)$$

1.5 Transformation der Matrix

Wir wenden uns jetzt der Matrix M_1 zu, deren Elemente folgende Gestalt haben:

$$\langle p\,|M_1|\,p'\rangle = \exp\left(\frac{i}{2}\arg\frac{\alpha'}{\alpha}\right)(1-\delta_{\alpha,-\alpha'})\delta_{z+\alpha,z'} \tag{26}$$

Der erste Faktor ist das in (19) definierte Gewicht des Weges, der nur aus einem einzigen Schritt besteht, der zweite Faktor schließt Umkehrpunkte aus, und der dritte sorgt dafür, daß nur die Elemente von Null verschieden sind, die einem Schritt von z in Richtung α nach z' entsprechen ($p = (z,\alpha), p' = (z',\alpha')$). Zur Berechnung der in (25) benötigten Determinante transformieren wir M_1 auf Blockdiagonalform mittels einer unitären Transformation U.

$$\hat{M}_1 := UM_1U^\dagger \tag{27}$$

Die Matrix U hat folgende Elemente:

$$\langle rs\beta\,|U|\,xy\alpha\rangle := \frac{1}{\sqrt{N}}e^{-i(rx+sy)}\delta_{\alpha,\beta} \tag{28}$$

Die Transformation beschränkt sich also auf die Ortsvariablen x und y und läßt die Richtung α unverändert. Die neuen Variablen r und s haben die Wertebereiche

$$r = \frac{2\pi}{N_x}(1,...,N_x) \quad , \quad s = \frac{2\pi}{N_y}(1,...,N_y) \tag{29}$$

Wir geben noch die Umkehrtransformation $U^\dagger$ an:

$$\left\langle xy\alpha\left|U^\dagger\right|rs\beta\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}e^{i(rx+sy)}\delta_{\alpha,\beta} \tag{30}$$

Jetzt berechnen wir die Matrixelemente der transformierten Matrix $\hat{M}_1$.

$$\begin{aligned}
\langle rs\alpha|\,\hat{M}_1\,|r's'\alpha'\rangle &= \langle rs\alpha|\,UM_1U^\dagger\,|r's'\alpha'\rangle \\
&= \sum_{x,y,x',y'} \langle rs\alpha|\,U\,|xy\alpha\rangle\,\langle xy\alpha|\,M_1\,|x'y'\alpha'\rangle\,\langle x'y'\alpha'|\,U^\dagger\,|r's'\alpha'\rangle \\
&= e^{\frac{i}{2}\arg\frac{\alpha'}{\alpha}}(1-\delta_{\alpha,-\alpha'})\frac{1}{N}\sum_{x,y,x',y'} e^{-i(rx+sy)}\delta_{x+\mathrm{Re}\,\alpha,x'}\delta_{y+\mathrm{Im}\,\alpha,y'}e^{i(r'x'+s'y')} \\
&= e^{\frac{i}{2}\arg\frac{\alpha'}{\alpha}}(1-\delta_{\alpha,-\alpha'})\frac{1}{N}\sum_{x,y} e^{i(r'-r)x}e^{i(s'-s)y}e^{i(r'\mathrm{Re}\,\alpha+s'\mathrm{Im}\,\alpha)} \\
&= e^{\frac{i}{2}\arg\frac{\alpha'}{\alpha}}(1-\delta_{\alpha,-\alpha'})\delta_{r,r'}\delta_{s,s'}e^{i(r\mathrm{Re}\,\alpha+s\mathrm{Im}\,\alpha)} \\
&= \delta_{r,r'}\delta_{s,s'}\,\langle\alpha|\,m(r,s)\,|\alpha'\rangle
\end{aligned} \tag{31}$$

Die Matrix $\hat{M}_1$ ist also diagonal bezüglich der Variablen r und s. Auf der Hauptdiagonalen liegen 4×4-Blöcke $m(r,s)$, deren Zeilen und Spalten den verschiedenen Richtungen α in der

Reihenfolge $\alpha = 1, i, -1, -i$ entsprechen, die nicht mittransformiert wurden. Die Matrix $m(r,s)$ hat folgende Gestalt:

$$m(r,s) = \begin{pmatrix} R & \lambda R & 0 & \lambda^* R \\ \lambda^* S & S & \lambda S & 0 \\ 0 & \lambda^* R^* & R^* & \lambda R^* \\ \lambda S^* & 0 & \lambda^* S^* & S^* \end{pmatrix} \tag{32}$$

Hier wurden die Abkürzungen $\lambda := e^{\frac{i\pi}{4}}$, $R := e^{ir}$ und $S := e^{is}$ eingeführt. Für (25) benötigen wir $\det(1 - vM_1)$:

$$\det(1 - vM_1) = \det(1 - v\hat{M}_1) = \prod_{r,s} \det(1 - vm(r,s)) \tag{33}$$

Im ersten Schritt wurde benutzt, daß $\hat{M}_1$ aus M_1 durch eine unitäre Transformation hervorgeht. Wir erhalten als Endergebnis für die kanonische Zustandssumme:

$$Z_N(T) = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \sqrt{\prod_{r,s} \left[(1+v^2)^2 - 2v\,(1-v^2)\,(\cos r + \cos s) \right]} \tag{34}$$

2 Der Phasenübergang

2.1 Existenz eines Phasenübergangs

Ein Phasenübergang äußert sich in einer Unstetigkeit einer Ableitung eines geeigneten thermodynamischen Potentials. Wir berechnen die freie Energie $f(T)$ pro Spin im thermodynamischen Limes.

$$\begin{aligned}
f(T) &= \lim_{N_x, N_y \to \infty} \frac{1}{N} \left[-k_B T \ln Z_N(T) \right] \\
&= -k_B T \Bigg\{ \ln 2 + 2 \ln \cosh(\beta J) + \\
&\quad + \lim_{N_x, N_y \to \infty} \frac{1}{2N} \sum_{r,s} \ln \left[(1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)(\cos r + \cos s) \right] \Bigg\} \\
&\overset{(*)}{=} -k_B T \Bigg\{ \ln 2 + 2 \ln (1-v^2)^{-\frac{1}{2}} + \\
&\quad + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} dr \int_0^{2\pi} ds \ln \left[(1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)(\cos r + \cos s) \right] \Bigg\} \\
&= -k_B T \Bigg\{ \ln 2 + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} dr \int_0^{2\pi} ds \ln (1-v^2)^{-2} + \\
&\quad + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} dr \int_0^{2\pi} ds \ln \left[(1+v^2)^2 - 2v(1-v^2)(\cos r + \cos s) \right] \Bigg\}
\end{aligned}$$

$$= \quad -k_B T \left\{ \ln 2 + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} dr \int_0^{2\pi} ds \ln \left[\left(\frac{1+v^2}{1-v^2} \right)^2 - \frac{2v}{1-v^2} (\cos r + \cos s) \right] \right\} \quad (35)$$

Beim Schritt $(*)$ haben wir die Definition (4) von v sowie für den Übergang zum Integral die aus (29) folgende Tatsache benutzt, daß genau ein r-Wert im Intervall $2\pi/N_x$ liegt; entsprechend liegt ein s-Wert im Intervall $2\pi/N_y$. Verwenden wir jetzt noch unter Zuhilfenahme von (4) sowie einfacher Identitäten der Hyperbelfunktionen

$$\begin{aligned} \left(\frac{1+v^2}{1-v^2} \right)^2 &= (\cosh^2(\beta J) + \sinh^2(\beta J))^2 = \cosh^2(2\beta J) \\ &= (1 - \sinh(2\beta J))^2 + 2\sinh(2\beta J) && (36) \\ \frac{2v}{1-v^2} &= 2\sinh(\beta J)\cosh(\beta J) = \sinh(2\beta J) && (37) \end{aligned}$$

so erhalten wir als Endergebnis für die freie Energie pro Spin im thermodynamischen Limes

$$\begin{aligned} f(T) &= -k_B T \Bigg\{ \ln 2 + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} dr \int_0^{2\pi} ds \times \\ &\quad \times \ln \Big[(1 - \sinh(2\beta J))^2 + \sinh(2\beta J)(2 - \cos r - \cos s) \Big] \Bigg\} && (38) \end{aligned}$$

Leider ist das Integral kaum weiter analytisch auswertbar. Wir interessieren uns für Unregelmäßigkeiten in (38). Diese sind zu erwarten, wenn das Argument des Logarithmus verschwindet. Dafür müssen beide Summanden in der eckigen Klammer gleich Null sein, insbesondere muß

$$\sinh \frac{2J}{k_B T_C} = 1 \quad (39)$$

gelten. Hier haben wir die kritische Temperatur („Curie-Temperatur“) T_C definiert. Man erhält für T_C

$$\frac{J}{k_B T_C} = \frac{1}{2} \operatorname{arsinh} 1 = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0,4407 \quad (40)$$

Wir müssen uns noch davon überzeugen, daß bei $T = T_C$ tatsächlich ein Phasenübergang vorliegt, d.h. daß eine der Ableitungen von $f(T)$ eine Unstetigkeit aufweist. Dazu entwickeln wir $f(T)$ um T_C nach Potenzen von $T - T_C$ und erhalten in der Umgebung von T_C

$$f(T) \approx a - b(T - T_C)^2 \ln |T - T_C| \quad (41)$$

mit gewissen Konstanten a und b. Man überzeugt sich leicht, daß $f(T)$ und dessen erste Ableitung bei T_C stetig sind, die zweite Ableitung dagegen logarithmisch divergiert. Bei $T = T_C$ liegt also ein Phasenübergang zweiter Ordnung vor.

2.2 Thermodynamische Größen

Die Wärmekapazität bei verschwindendem Magnetfeld verhält sich gemäß (41) wie

$$C_{H=0} = -T\frac{d^2 f}{dT^2} \sim \ln|T - T_C| \tag{42}$$

Das logarithmische Divergieren der Wärmekapazität entspricht einem kritischen Exponenten $\alpha = 0$.

Die uns eigentlich interessierende Größe ist die spontane Magnetisierung $M_S(T)$, die beim eindimensionalen Ising-Modell ohne äußeres Magnetfeld immer Null ist. Eine Berechnung über

$$M(T, B_0) = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial B_0} \ln Z_N(T, B_0) \tag{43}$$

mit anschließendem Grenzübergang $B_0 \to 0$ ist hier nicht möglich, weil wir von vorneherein ohne äußeres Magnetfeld B_0 gerechnet haben. Stattdessen verwenden wir die Beziehung

$$M_S^2(T) = \mu^2 \langle S \rangle^2 = \mu^2 \langle S_i \rangle \langle S_{i+j} \rangle = \mu^2 \lim_{j\to\infty} \langle S_i S_{i+j} \rangle \tag{44}$$

aus der sich folgendes Ergebnis ableiten läßt:

$$M_S(T) = \begin{cases} \mu \left[1 - \sinh^{-4}(2\beta J)\right]^{\frac{1}{8}} & , \quad T < T_C \\ 0 & , \quad T > T_C \end{cases} \tag{45}$$

Dies entspricht einem kritischen Exponenten des Ordnungsparameters $\beta = \frac{1}{8}$. Oberhalb von T_C verschwindet M_S, unterhalb der kritischen Temperatur ist eine spontane Magnetisierung ohne äußeres Magnetfeld vorhanden.

Literatur

[1] W. Nolting, **Grundkurs: Theoretische Physik** Band 6, Statistische Physik

[2] L.D. Landau, E.M. Lifschitz, **Lehrbuch der Theoretischen Physik** Band 5, Statistische Physik Teil 1