

# 7 Das Isingmodell und seine Transfermatrix

## 7.1 Das Isingmodell: Definition und Molekularfeldtheorie

Das Isingmodell ist ein sehr einfaches Modell für einen *Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergang*. Es ist eines der wenigen Modelle mit Wechselwirkung, bei denen es (manchmal!) möglich ist, die Zustandssumme bzw. die Freie Energie explizit analytisch zu berechnen und welches tatsächlich einen Phasenübergang zeigt.

Das Isingmodell <sup>1</sup> wurde ursprünglich zur Beschreibung des Ferromagnetismus vorgeschlagen, läßt sich aber auf viele andere Phänomene (besser) anwenden. Es ist eines der meist untersuchten Modelle der statistischen Mechanik, mit mehr als 12000 Publikationen (1969-1995), und derzeit ca. 800 Publikationen pro Jahr.

Allgemeine Definition des Isingmodells: Netzwerk von Punkten; jeder Gitterplatz kann zwei Zustände einnehmen, Energie abhängig von der dadurch definierten Konfiguration des Systems.

Beispiele:

2 Werte	System
$\uparrow, \downarrow$ (Spin $\frac{1}{2}$ )	magnetisches System
besetzt, leer	„Gittergas“, z.B. Edelgasatome auf Graphit
Elemente $A, B$	binäre Legierung, z.B. Messing
zwei Basenpaare	DNA

Anwendungen weit über Physik hinaus: neuronale Netze, Bio-Membranen, soziales Verhalten (na ja), Kapitalmärkte ... Einige Zitate finden sich bei [Reichl, 1998], Kap. 8.

Wir legen uns auf die magnetische Sprechweise fest und denken an Spins  $\frac{1}{2}$ . Diese sollen in einem externen Magnetfeld  $h$  stecken und kurzreichweitig über eine „Austauschkonstante“  $J$  miteinander wechselwirken. Gegeben sei also ein Gitter mit  $N$  Gitterplätzen  $i$  mit Variablen  $S_i = \pm 1$

$$H = -h \sum_i S_i - J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (7.1)$$

(Doppelsumme über NN-Paare, ohne Doppelzählung);  $J > 0$  für Ferromagneten,  $J < 0$  für Antiferromagneten. Für  $h = 0, J > 0$ :  $H$  minimal, wenn  $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$  oder  $\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$ . Aber: nicht Energie muss minimiert werden, sondern freie Energie; für die ist die Entropie wichtig, die mit der Zahl der möglichen Konfigurationen des Systems verknüpft ist. Da es viel mehr ungeordnete als geordnete Konfigurationen gibt, wird bei hohen  $T$  eine ungeordnete Konfiguration vorliegen, während bei  $T \rightarrow 0$  die Energie zu minimieren ist. Es bestehen also Aussichten auf einen Ordnungs-Unordnungs-Phasenübergang, wie er in Messing (Cu-Zn-Legierung) auch wirklich beobachtet wird.

Wir betrachten zunächst den einfachsten Fall

$$J = 0.$$

---

<sup>1</sup>Ernst Ising, geboren 10. 5. 1900 in Köln, aufgewachsen in Bochum, 1924 Promotion in Hamburg über sein Modell in 1 Dimension. Danach Industrie-Tätigkeit, Ausbildung und Tätigkeit als Lehrer. Als Jude aus dem Schuldienst entfernt, als Zwangsarbeiter den Krieg überlebt, nach USA ausgewandert, Professor für Physik in Peoria, Il. Gestorben 11. 5. 1998.

Dann liefert die Zustandssumme für  $N$  Gitterplätze

$$\begin{aligned}
 Z &= \text{Sp} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_1, \dots, S_N\}} e^{-\beta H} \\
 &= \sum_{S_1=\pm 1} \left( \sum_{S_2=\pm 1} \left( \sum \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp \beta h (S_1 + S_2 + \dots S_N) \right) \right) \\
 &= \left( \sum_{S_1=\pm 1} e^{\beta h S_1} \right) \left( \sum_{S_2=\pm 1} e^{\beta h S_2} \right) \cdots (\dots) \\
 &= (2 \cosh \beta h)^N
 \end{aligned} \tag{7.2}$$

Dann berechnen wir weiter

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} (e^{-\beta H} S_i) = \frac{\sum_{S_i=\pm 1} S_i e^{\beta h S_i}}{\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta h S_i}}$$

Im Zähler steht nur einer der  $N$  Faktoren von  $\text{Sp} (e^{-\beta H} S_i)$ , im Nenner ein Faktor von  $Z$ ; der Rest kürzt sich.

Also

$$\langle S_i \rangle = \frac{e^{\beta h} - e^{-\beta h}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}} = \frac{\sinh \beta h}{\cosh \beta h} = \tanh \beta h \tag{7.3}$$

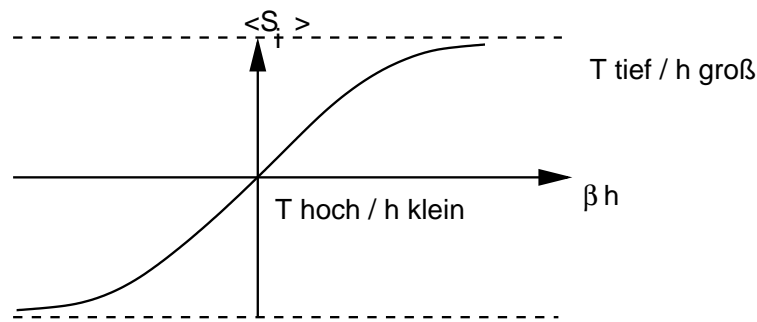


Abbildung 7.1: Magnetisierungskurve freier Spins 1/2

Offenbar ist  $\langle S_i \rangle$  unabhängig von  $i$ ; kein Wunder, da  $h$  unabhängig von  $i$ .

$T$  hoch:  $\beta h \ll 1 \Rightarrow \tanh \beta h \approx \beta h$  und man erhält als Hochtemperaturgrenzfall der Magnetisierung

$$\langle S_i \rangle \approx \frac{h}{k_B T}$$

das so genannte Curie-Gesetz (inverse Proportionalität zur Temperatur). Wir denken uns eine Rechnung analog zu (7.3) mit  $S_i S_j$  statt  $S_i$ . Wegen der Faktorisierungseigenschaft von  $Z$  sieht man

$$\langle S_i S_j \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \quad (i \neq j), \tag{7.4}$$

in diesem Spezialfall  $J = 0$  sind die Spins unkorreliert.

Spezifische Wärme:

$$C_h = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_h = -T \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right|_h = \dots = N k_B \frac{\beta^2 h^2}{\cosh^2 \beta h}$$

Exponentiell klein für tiefe  $T$ , mit einem Maximum bei mittleren  $T$ , das als „Schottky-Anomalie“ bezeichnet wird: typisch für Systeme mit einer Anregungslücke überm Grundzustand. <sup>2</sup>

<sup>2</sup>Walter Schottky, 1886-1976. Bedeutende Beiträge zur Elektronik und Halbleiterphysik [Röhren, Dioden, Begriff des Lochs im Valenzband].

Den Fall  $J \neq 0$  behandelt man z.B. jetzt mit dem Variationsprinzip nach Peierls-Boguljubow:

$$F \leq F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 \quad (7.5)$$

mit  $H$  aus (7.1) und

$$H_0 = -h_{\text{eff}} \sum_i S_i. \quad (7.6)$$

Daraus ergibt sich die in §4 für allgemeine Spinquantenzahl  $S$  diskutierte Molekularfeldtheorie; hier natürlich in der Variante für  $S = 1/2$ .

Mit der Abkürzung

$$\sigma = \langle S_i \rangle_0 = \tanh \beta h_{\text{eff}}$$

und der Koordinationszahl  $z$  des Gitters, also der Zahl der nächsten Nachbarn jedes Gitterplatzes ergibt sich folgende **Selbstkonsistenzgleichung** für die Magnetisierung  $\sigma$ :

$$\text{artanh } \sigma = \beta(h + zJ\sigma) \quad (7.7)$$

Die grafische Lösung diskutieren wir anhand von Abb. 7.2:

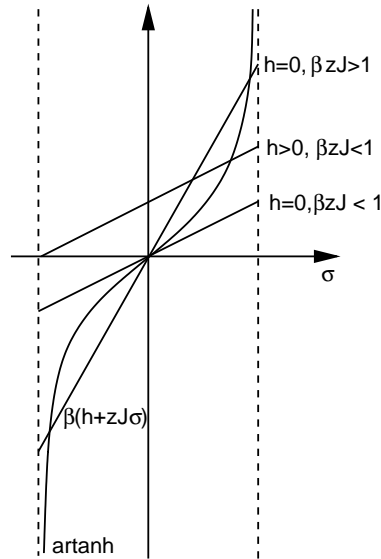


Abbildung 7.2: Grafische Lösung der Selbstkonsistenzgleichung für die MFA des Isingmodells

Offenbar gibt es einen Phasenübergang bei einer Temperatur

$$T_c = \frac{zJ}{k_B}, \quad (7.8)$$

die nur von der Koordinationszahl  $z$  abhängt, nicht direkt von der räumlichen Dimension  $D$ . Insbesondere ergibt sich auch für  $D = 1$  ein Phasenübergang, was nicht den Tatsachen entspricht, wie wir weiter unten sehen werden.

Die Selbstkonsistenzgleichung hat für  $h = 0$  immer *auch* die Lösung  $\sigma = 0$ , aber für  $T < T_c$  entspricht diese einem *Maximum* der „variationellen freien Energie“  $\tilde{F} := F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0$ .

$h \neq 0$  bewirkt eine Parallelverschiebung der Geraden  $\beta(h + zJ\sigma)$  in der grafischen Lösung der Selbstkonsistenzgleichung. Dabei wird das Minimum mit  $h\sigma > 0$  der variationellen freien Energie abgesenkt.

Qualitativ ergibt sich die in Abb. 7.3 gezeigte Magnetisierungskurve.

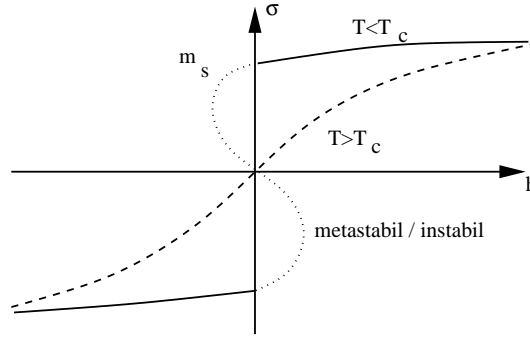


Abbildung 7.3: Die MFA-Magnetisierung des Isingmodells, schematisch für  $T < T_c$  und  $T > T_c$

$m_s$  ist die **spontane Magnetisierung**, der Ordnungsparameter dieses Phasenübergangs.

Eine analytische Diskussion der Selbstkonsistenzgleichung für  $T$  nahe bei  $T_c$  und kleine Felder liefert den *kritischen Exponenten*  $\beta = 1/2$  für den Ordnungsparameter, d.h. die spontane Magnetisierung ist für  $T$  leicht unterhalb  $T_c$  proportional zu  $\sqrt{T_c - T}$ , und zwar für beliebige Gittertypen und beliebige räumliche Dimension.

## 7.2 Die Transfermatrix: kein Phasenübergang in einer Dimension

Die skizzierte Molekularfeldapproximation (MFA) sagt also für jedes  $z$  (Koordinationszahl) einen Phasenübergang voraus, leider auch für eine Dimension. Ising zeigte aber schon 1924, dass in einer Dimension kein Phasenübergang auftritt, und wir zeigen das jetzt auch. Das gibt uns Gelegenheit, ein kleines Stück praktischer Magie kennenzulernen: die **Transfermatrix-Methode** (Kramers<sup>3</sup> und Wannier<sup>4</sup>, ca. 1940), mit deren Hilfe Isings Ergebnis nach einigen Minuten dasteht. Die Transfermatrix-Methode ist bei allen Arten von eindimensionalen Problemen nützlich, z.B. auch im Maschinenbau bei der Analyse eindimensionaler schwingungsfähiger Systeme (12-Zylinder-Kurbelwellen etc.). Auch die (formidable) Lösung des zweidimensionalen Isingmodells läßt sich über die Transfermatrix angehen.

Wir schreiben für eine Kette von  $N$  Spins mit periodischen Randbedingungen („ $N + 1 = 1$ “) das Isingmodell mit Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn in einer symmetrischen Form hin:

$$H = -h \sum_i \frac{S_i + S_{i+1}}{2} - J \sum_i S_i S_{i+1} \quad (7.9)$$

$$\Rightarrow Z = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left( \beta J S_i S_{i+1} + \beta h \frac{S_i + S_{i+1}}{2} \right). \quad (7.10)$$

<sup>3</sup>Hendrik Anthony Kramers, 1894-1952. „Kramers-Kronig-Relationen“ für Absorption und Dispersion von Wellen, inelastische Lichtstreuung, Molekülphysik, Theorie der Reaktionsraten, Idee der Renormierung von Massen und Kopplungen in der Quantenelektrodynamik.

<sup>4</sup>Gregory Hugh Wannier, 1911-1983. Festkörperphysiker: „Exziton“ [= Elektron-Loch-Paar], Dynamik von Elektronen in Festkörpern, Statistische Mechanik.

Der Ausdruck unter dem Produktzeichen hängt von den beiden Größen  $S_i$  und  $S_{i+1}$  ab, die jeweils die Werte  $\pm 1$  annehmen können  $\Rightarrow 2 \times 2$ -Matrix  $V$  mit Elementen  $V_{S_i S_{i+1}}$  (dabei steht links oben das Element  $V_{++}$ , usw.):

$$V = \begin{pmatrix} e^{\beta(h+J)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} \quad (7.11)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow Z &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} V_{S_1 S_2} V_{S_2 S_3} \cdots V_{S_{N-1} S_N} V_{S_N S_1} \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} (V^N)_{S_1 S_1} = \text{Sp}(V^N). \end{aligned} \quad (7.12)$$

Das ist die fundamentale Bedeutung der Transfermatrix  $V$ .

Seien nun  $\lambda_{\pm}$  die beiden Eigenwerte von  $V$ ,  $\lambda_+ > \lambda_-$ . (Nach dem Satz von Perron-Frobenius ist der größte Eigenwert einer Matrix mit nur positiven Einträgen nicht entartet; für den hier vorliegenden Fall einer  $2 \times 2$ -Matrix kann man das natürlich leicht explizit überprüfen, s.u.) Dann folgt im thermodynamischen Limes für die freie Energie pro Spin

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} &= -\beta^{-1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \text{Sp}(V^N) = -\beta^{-1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln(\lambda_+^N + \lambda_-^N) \\ &= -\beta^{-1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left( \lambda_+^N \left( 1 + \frac{\lambda_-^N}{\lambda_+^N} \right) \right) = -\beta^{-1} \ln \lambda_+. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Wir brauchen also **nur den größten Eigenwert der Transfermatrix!** Da die Transfermatrix eine  $2 \times 2$ -Matrix ist, deren Einträge beliebig freundliche Funktionen von  $T, J$  und  $h$  sind, kann man keinerlei Singularitäten in  $F$  erwarten, die einen Phasenübergang signalisieren könnten. Wir rechnen das aber auch noch rasch explizit nach:

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh \beta h \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta h + e^{-2\beta J}} \quad (7.14)$$

und stellen fest, dass sich für  $J \rightarrow 0$  in der Tat das schon bekannte Resultat ergibt. Für den Ordnungsparameter erhalten wir

$$\sigma = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle = - \left. \frac{\partial(F/N)}{\partial h} \right|_T = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}}}. \quad (7.15)$$

Diese Funktion strebt für jedes  $T \neq 0$  mit  $h \rightarrow 0$  gegen 0; es gibt also keine spontane Magnetisierung für  $T \neq 0$ . Andererseits: für  $T \rightarrow 0$  ist  $\sigma = \text{sign} h$ , also 1 für jedes noch so kleine  $h$ ;  $\Rightarrow$  Sprechweise: Das Isingmodell in einer Dimension hat einen Phasenübergang bei  $T_c = 0$ .

Das **zweidimensionale** Isingmodell kann man, wie bereits erwähnt, ebenfalls über die Transfermatrix angehen; dabei verbindet dann  $V$  nicht zwei benachbarte Spins, sondern zwei (im Grenzfall unendlich lange!) „Reihen“ von Spins. Jede solche Reihe von Spins hat dann  $2^L$  (mit  $L \rightarrow \infty$  am Ende der Rechnung) mögliche Zustände, statt der 2 Zustände für jeden einzelnen Spin im eindimensionalen Fall. Damit ist die Transfermatrix nicht mehr zweidimensional, sondern (im Grenzfall) unendlichdimensional, und dann kann der größte Eigenwert auch (im Grenzfall) nichtanalytisch von Temperatur, Feld und Kopplung abhängen, was den PÜ möglich macht. Die Rechnung gestaltet sich dem entsprechend erheblich aufwändiger und die freie Energie des quadratischen Gitters bei  $h = 0$  wurde von Onsager 1944 publiziert.<sup>5</sup> Auf einer Konferenz 1948 machte Onsager eine Randbemerkung

<sup>5</sup>Lars Onsager, 1903-1976. Physikochemiker; Theorie irreversibler Prozesse, „Reziprozitätsrelationen“ zwischen Transportkoeffizienten, dafür Nobelpreis Chemie 1968.

des Inhalts, der kritische Exponent  $\beta$  (s.o.) sei  $1/8$ . Der Beweis dieser Behauptung wurde erst 1952 von C.N Yang erbracht. <sup>6</sup> Eine von Schultz, Mattis und Lieb [Schultz et al., 1964] gefundene Abbildung des zweidimensionalen Isingmodells mit  $h = 0$  auf ein Modell wechselwirkungsfreier Fermionen in *einer* Dimension gestattet eine Darstellung der Lösung mit halbwegs vertretbarem Aufwand; für eine Kurzfassung vgl. etwa Chap. 16 in dem Lehrbuch [Wannier, 1987]. (Der hier angedeutete Zusammenhang zwischen einem  $D$ -dimensionalen quantenmechanischen und einem  $D + 1$ -dimensionalen klassischen Modell trägt wesentlich über das Isingmodell hinaus und ist in den letzten 2-3 Jahrzehnten zu einem fruchtbaren Werkzeug der Statistischen Mechanik geworden.) Das zweidimensionale Modell mit  $h \neq 0$  ist bis zum heutigen Tage ebenso ungelöst wie das dreidimensionale Modell. Allerdings kann man mithilfe von Computersimulationen (sogenannten „Monte-Carlo-Methoden“, die wir noch besprechen werden) sehr genaue numerische Werte aller gewünschten physikalischen Größen berechnen. Wir geben hier einige Ergebnisse für das zweidimensionale Modell (Quadratgitter) an. Die kritische Temperatur bei  $h = 0$  ist

$$k_B T_c = -\frac{2J}{\ln(\sqrt{2} - 1)} = 2.269185 \dots J. \quad (7.16)$$

Für  $T < T_c$  (und  $J > 0$ ) gibt es eine spontane Magnetisierung

$$|m_s| \sim \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right)^{\frac{1}{8}} \quad (T \sim T_c, \text{ aber } T < T_c) \quad (7.17)$$

Der kritische Exponent  $\beta = 1/8$ . Die spezifische Wärme divergiert logarithmisch

$$c \sim \ln \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| \quad (7.18)$$

(kritischer Exponent  $\alpha = 0_{\log}$ .)

Die Suszeptibilität

$$\chi \sim \left( \frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-\frac{7}{4}} \quad (\gamma = \frac{7}{4}). \quad (7.19)$$

Interessant ist auch

$$m \sim h^{\frac{1}{8}} \text{ für } T \equiv T_c; \delta = 15. \quad (7.20)$$

Im Gegensatz dazu liefert die Molekularfeldapproximation für die Exponenten in alphabetischer Reihenfolge die Werte 0 (Sprung),  $1/2$ , 1, 3.

### 7.3 Die Transfermatrix: weitere Berechnungen

Zunächst sei hier auf einen Zusammenhang zwischen Dynamik und statistischer Mechanik hingewiesen. Die Transfermatrix des eindimensionalen Isingmodells (7.11) kann man in einer natürlichen Schreibweise ausdrücken als

$$V_{S_i S_{i+1}} = \langle S_i | e^{-\beta H} | S_{i+1} \rangle, \quad (7.21)$$

also ganz analog zu

$$G_{ij} = \langle \phi_i | e^{-iHt/\hbar} | \phi_j \rangle \quad (7.22)$$

---

<sup>6</sup>Chen Ning Yang, geb. 1922. Paritätsverletzung in schwacher Wechselwirkung; Nichtabelsche Eichfeldtheorien. Nobelpreis 1957 mit Tsung Dao Lee. Auch wichtige Beiträge zur Statistischen Mechanik.

dem Matricelement des Zeitentwicklungsoperators zwischen Zuständen  $|\phi_i\rangle$  und  $|\phi_j\rangle$  (verwandt mit der Greenfunktion). Die unmittelbare Verwandtschaft dieser beiden Ausdrücke ist offensichtlich und es verwundert nicht, dass zur Berechnung ähnliche Techniken verwendet werden. Allerdings ist  $e^{-\beta H}$  ein mathematisch sehr viel angenehmerer Ausdruck als der Zeitentwicklungsoperator; die Entwicklung in der *imaginären Zeit*  $-i\beta\hbar$  ist erheblich durchschaubarer als in der reellen / realen. Gelegentlich werden deshalb Größen in der Imaginärzeit berechnet und dann zu reellen Zeiten analytisch fortgesetzt. Die Crux dabei ist, dass die „analytische“ Fortsetzung numerisch durchzuführen ist, was viele Fehlerquellen birgt.

Die Transfermatrix enthält noch weitere Informationen außer der freien Energie; beispielsweise berechnet man den Erwartungswert von  $S_k$ , also die (relative) Magnetisierung:

$$\langle S_k \rangle = \frac{\sum_{\{S_i\}} S_k e^{-\beta H}}{\sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H}} = \frac{\sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} V_{S_1 S_2} V_{S_2 S_3} \cdots V_{S_{k-1} S_k} S_k V_{S_k S_{k+1}} \cdots V_{S_{N-1} S_N} V_{S_N S_1}}{\sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} V_{S_1 S_2} V_{S_2 S_3} \cdots V_{S_{k-1} S_k} V_{S_k S_{k+1}} \cdots V_{S_{N-1} S_N} V_{S_N S_1}}. \quad (7.23)$$

Die durch ihre Matricelemente  $W_{S_k S_{k+1}} = S_k V_{S_k S_{k+1}}$  definierte Matrix lässt sich als  $W = \sigma_z V$  schreiben, mit der Paulimatrix  $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ; das kehrt gerade die Vorzeichen in der zweiten Zeile von  $V$  um. Damit schreibt man

$$\langle S_k \rangle = \frac{\sum_{S_1=\pm 1} \langle S_1 | V^{k-1} \sigma_z V^{N-k+1} | S_1 \rangle}{\sum_{S_1=\pm 1} \langle S_1 | V^N | S_1 \rangle} = \frac{\text{Sp} V^{k-1} \sigma_z V^{N-k+1}}{\text{Sp} V^N} = \frac{\text{Sp} \sigma_z V^N}{\text{Sp} V^N}. \quad (7.24)$$

Im letzten Schritt wurde die Invarianz der Spur unter zyklischer Vertauschung genutzt. Führt man die Spur in Eigenzuständen von  $V$  aus, so überlebt nur der Term zum dominanten Eigenvektor (zum Eigenwert  $\lambda_+$ ):

$$\langle S_k \rangle = \frac{\lambda_+^N \langle \phi_+ | \sigma_z | \phi_+ \rangle}{\lambda_+^N} = \langle \phi_+ | \sigma_z | \phi_+ \rangle \quad (7.25)$$

wo  $|\phi_+\rangle$  der Eigenvektor zum größeren Eigenwert ist. Dieser Eigenvektor enthält also auch nützliche Informationen; aber nicht nur er. Die *Korrelationsfunktion*

$$g(m-n) = \langle S_m S_n \rangle - \langle S_m \rangle \langle S_n \rangle \quad (7.26)$$

ist eine Größe, die z.B. in Streuexperimenten gemessen wird. Wie weiter oben gezeigt, ist  $g(m-n) = 0$  für  $J = 0$ . Wir schreiben (oBdA  $n < m$ )

$$\langle S_m S_n \rangle = \frac{\sum_{S_1=\pm 1} \langle S_1 | V^{n-1} \sigma_z V^{m-n} \sigma_z V^{N-m+1} | S_1 \rangle}{\sum_{S_1=\pm 1} \langle S_1 | V^N | S_1 \rangle} = \frac{\text{Sp} V^{n-1} \sigma_z V^{m-n} \sigma_z V^{N-m+1}}{\text{Sp} V^N} = \frac{\text{Sp} \sigma_z V^{m-n} \sigma_z V^{N-(m-n)}}{\text{Sp} V^N} \quad (7.27)$$

und wenn uns nur große Abstände  $m-n$  interessieren, sollten die hohen Potenzen von  $V$  nur den dominanten Eigenvektor „übriglassen“; als führenden Beitrag erwarten wir also

$$\langle S_n S_m \rangle = \frac{\langle \phi_+ | \sigma_z V^{m-n} \sigma_z \lambda_+^{N-(m-n)} | \phi_+ \rangle}{\lambda_+^N} \quad (7.28)$$

und mit Einschieben von

$$\mathbf{1} = |\phi_+\rangle \langle \phi_+| + |\phi_-\rangle \langle \phi_-|$$

ergibt sich

$$\langle S_n S_m \rangle = \lambda_+^{-N} \langle \phi_+ | \sigma_z \left( \lambda_+^{m-n} |\phi_+\rangle \langle \phi_+| + \lambda_-^{m-n} |\phi_-\rangle \langle \phi_-| \right) \sigma_z | \phi_+ \rangle \lambda_+^{N-(m-n)}. \quad (7.29)$$

Der führende Term ist natürlich wieder der mit  $|\phi_+\rangle\langle\phi_+|$  in der Mitte:

$$\langle S_n S_m \rangle \approx \langle \phi_+ | \sigma_z | \phi_+ \rangle \langle \phi_+ | \sigma_z | \phi_+ \rangle = \langle S_n \rangle \langle S_m \rangle \quad (7.30)$$

so dass für die Korrelationsfunktion gerade die *nichtführenden*<sup>7</sup> Terme wichtig sind!

$$g(m-n) = \langle \phi_+ | \sigma_z | \phi_- \rangle \langle \phi_- | \sigma_z | \phi_+ \rangle \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^{m-n} = |\langle \phi_+ | \sigma_z | \phi_- \rangle|^2 \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^{m-n}. \quad (7.31)$$

Der Quotient aus nächstführendem (subleading) und führendem Eigenwert ist also der Faktor, um den die Korrelationsfunktion abnimmt, wenn man den Abstand um eine Gitterkonstante (=Längeneinheit) vergrößert.

Für die *Korrelationslänge*  $\xi$ , definiert durch

$$g(m-n) = g_0 \exp\left(-\frac{|m-n|}{\xi}\right) \quad |m-n| \gg 1 \quad (7.32)$$

ergibt sich

$$\xi^{-1} = \ln\left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-}\right). \quad (7.33)$$

Am kritischen Punkt (Phasenübergang höherer Ordnung) divergieren alle Korrelationslängen und aus exponentiellen Abfallgesetzen (7.32) der Korrelationsfunktionen werden Potenzgesetze,  $g(m-n) \sim |m-n|^{-a}$ . Das deutet darauf hin, dass kritische Punkte auftreten, wenn der größte Eigenwert der Transfermatrix entartet ist. Wegen des schon einmal erwähnten Satzes von Perron-Frobenius [Gantmacher, 1966] (Band II) kann das nur asymptotisch auftreten, wenn die Dimension der Transfermatrix unendlich groß wird, wenn man also nicht eine Ising-Kette betrachtet, ( $1 \times \infty$ , mit  $2 \times 2$ -Transfermatrix), sondern ein zweidimensionales Modell ( $L \times \infty$ , mit  $2^L \times 2^L$ -Transfermatrix, für  $L \rightarrow \infty$ ).

Betrachten wir also ein Isingsystem der Größe  $L \times \infty$ . Die Konfiguration der  $j$ -ten Reihe von  $L$  Spins ist  $\Sigma_j := (S_{1j}, S_{2j}, S_{3j}, \dots, S_{Lj})$ ; wir nehmen zyklische Randbedingungen an, d.h.  $S_{L+1,j} = S_{1,j}$ . Zusammen mit den in der anderen Richtung bereits eingeführten zyklischen Randbedingungen bedeutet das, dass das rechteckige Gitter auf einen Torus gewickelt wird. Die Randbedingungen erleichtern die Mathematik, stören aber für hinreichend großes System die Physik nicht. Die Transfermatrix vermittelt dann zwischen den Reihen  $j$  und  $j+1$ . Um sie möglichst symmetrisch zu gestalten, berücksichtigen wir die Wechselwirkungen innerhalb der Reihen nur zur Hälfte (denn jede Reihe tritt ja in zwei Transfermatrizen auf), die Wechselwirkungen zwischen den Reihen aber voll. Damit ist

$$\langle \Sigma_j | V | \Sigma_{j+1} \rangle = \exp \left\{ \beta \sum_{i=1}^L \left[ J \left( S_{ij} S_{ij+1} + \frac{1}{2} S_{ij+1} S_{i+1j+1} + \frac{1}{2} S_{ij} S_{i+1j} \right) + \frac{h}{2} (S_{ij} S_{ij+1}) \right] \right\} \quad (7.34)$$

Die  $2^L$  möglichen Konfigurationen  $\Sigma_j$  kann man z.B. durch eine Zahl von 0 bis  $2^L - 1$  durchnummerieren, wobei die Binärdarstellung dieser Zahl direkt als Spinkonfiguration gelesen werden kann, wenn man 0 mit  $\uparrow$  und 1 mit  $\downarrow$  identifiziert (oder umgekehrt). Problematisch ist die Frage, ob Lanczos hier wirklich die Methode der Wahl ist, um den größten Eigenwert auszurechnen, da doch die Transfermatrix alles andere als dünn besetzt ist; im

<sup>7</sup>Da für die einfache Isingkette die Transfermatrix zweidimensional ist, gibt es außer dem führenden lediglich einen weiteren Eigenwert; für Systeme mit größerer Transfermatrix (s.u.) ist hier natürlich der zweitgrößte Eigenwert bzw. der zugehörige Eigenvektor zu verwenden.

Gegenteil: *alle* Elemente sind positiv. Hier kann man sich mit einem Trick behelfen; man schreibt nämlich  $V$  als Produkt von  $L$  dünn besetzten Matrizen

$$V = V_L V_{L-1} V_{L-2} \dots V_2 V_1, \quad (7.35)$$

wobei  $V_i$  nur die Kopplungen zwischen  $i - 1$  und  $i$  in Reihe  $j + 1$ , zwischen  $i$  und  $i + 1$  in Reihe  $j$  sowie die Kopplung den Plätzen  $i$  in den beiden Reihen  $j$  und  $j + 1$  enthält. Die Kopplungen innerhalb der Reihen werden wieder nur zur Hälfte berücksichtigt, da sie in zwei Matrizen auftreten. Technische Details zur Gestalt der Matrizen  $V_i$  lese man bei Interesse in Chap. 11.3 von [Thijssen, 1999] nach. Dieser Autor stellt auch auf seiner Internetseite entsprechende Programme zur Verfügung.

### Isingmodell: Skalenverhalten der freien Energie für Streifen der Breite $L$

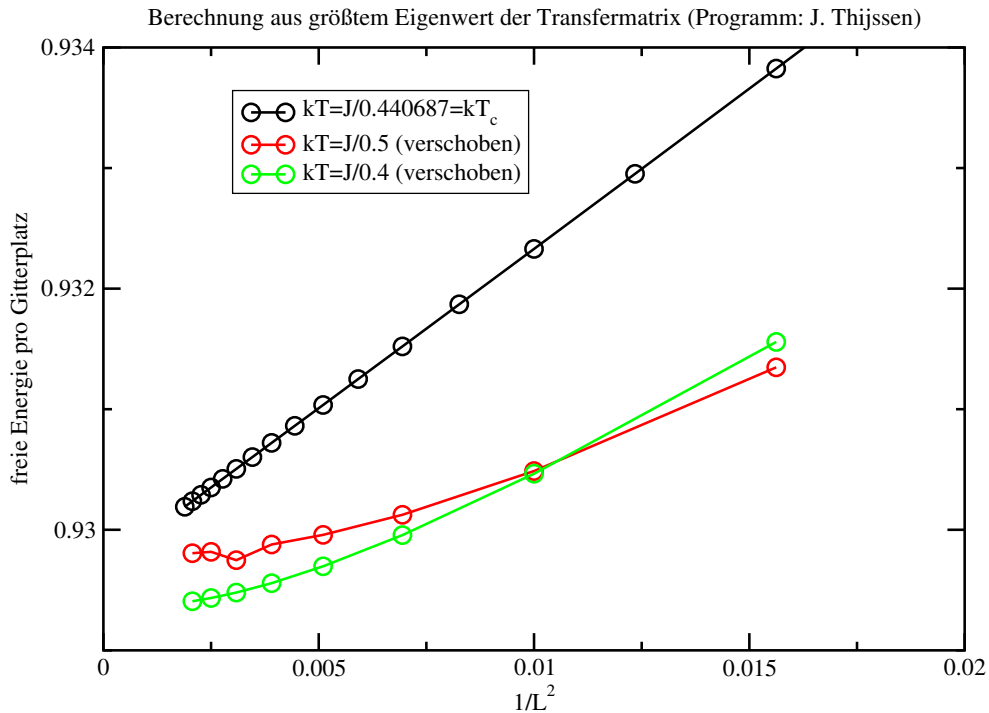


Abbildung 7.4: Finite-Size-Scaling der freien Energie im zweidimensionalen Isingmodell oberhalb, unterhalb und an der kritischen Temperatur

Natürlich steht für konkrete Berechnungen nur ein sehr begrenzter Bereich von  $L$ -Werten zur Verfügung. Praktisch berechnet man die freie Energie pro Gitterplatz, also

$$f = -\frac{1}{\beta L} \ln \lambda_{max}, \quad (7.36)$$

wobei  $\lambda_{max}$  der größte Eigenwert für das System der Breite  $L$  ist, und versucht aus Werten für mehrere  $L$  nach  $L \rightarrow \infty$  zu extrapolieren (finite size scaling). Dabei kann man insbesondere am kritischen Punkt ausnutzen, dass das System dort keine ausgezeichnete Längenskala hat („Fluktuationen auf allen Längenskalen“), nur so kann es nämlich zu den im kritischen Bereich beobachteten Potenzgesetzen kommen. Mithilfe der *konformen Feldtheorie* (Referenzen findet man in [Thijssen, 1999]) kann man zeigen, dass die freie Energie zweidimensionaler Modelle

am kritischen Punkt wie folgt von der Streifenbreite abhängt:

$$f_L = f_\infty - \frac{\pi c}{6} \frac{1}{L^2}. \quad (7.37)$$

Dabei definiert die Zahl  $c$  (*zentrale Ladung*), für die aus theoretischen Gründen nur bestimmte Werte zulässig sind, die *Universalitätsklasse* (d.h. die kritischen Exponenten) des Phasenübergangs. Das heißt, man kann aus der Not der endlichen Streifenbreite eine Tugend machen (vorausgesetzt, die konforme Feldtheorie gilt) und *allein* aus dem Skalenverhalten der freien Energie die kritischen Exponenten des Modells bestimmen.

In Abbildung 7.4 ist die freie Energie pro Gitterplatz für drei verschiedene Temperaturen dargestellt, nämlich an der kritischen Temperatur<sup>8</sup> sowie etwas darüber und darunter. Man sieht, dass bei der kritischen Temperatur (und nur dort) die Werte auf einer Geraden liegen; für ein Modell mit unbekannter kritischer Temperatur hätte man diese daraus (näherungsweise) bestimmen können. Die Rechnungen wurden mit dem von J. Thissen geschriebenen (leicht modifizierten) Lanczos-Programm<sup>9</sup> durchgeführt, für  $L$  zwischen 6 und 23. Auf einem PC Baujahr 2004 beansprucht das nicht viel Geduld. (Zwischendurch Kaffeetrinken lohnt nicht.) Man beachte, dass hier immerhin der größte Eigenwert einer (8 Millionen  $\times$  8 Millionen)-Matrix bestimmt wird. Die Werte der freien Energie für die nichtkritischen Temperaturen wurden verschoben, um in die Grafik zu passen. Die Steigung der kritischen Daten liefert mit guter Genauigkeit (Prozentbereich) den erwarteten Wert  $c = \frac{1}{2}$  für die zentrale Ladung.

## Literatur

- [Gantmacher, 1966] Gantmacher, F. (1966). *Matrizenrechnung*. Dt. Verl. d. Wiss. 2 Bände. 7.3
- [Reichl, 1998] Reichl, L. E. (1998). *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley, New York, 2nd edition. 822 pp. 7.1
- [Schultz et al., 1964] Schultz, T., Mattis, D., and Lieb, E. (1964). Two-dimensional Ising model as a soluble problem of many fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 36:856–871. 7.1
- [Thijssen, 1999] Thijssen, J. (1999). *Computational Physics*. Cambridge University Press, New York. 7.3, 7.3
- [Wannier, 1987] Wannier, G. H. (1987). *Statistical Physics*. Dover Publications, New York. 7.1

---

<sup>8</sup>Die kritische Temperatur des Isingmodells kann für dieses und eine Klasse von anderen Gittern bestimmt werden, *ohne* das Modell komplett zu lösen. Das geschieht mit einem eleganten Trick: man kann die Tieftemperatureigenschaften des Modells auf einem gewissen Gitter mit den Hochtemperatureigenschaften des Modells auf dem so genannten dualen Gitter verknüpfen. Wenn das Gitter und das duale Gitter identisch sind, kann man den kritischen Punkt als Grenze zwischen Hochtemperaturverhalten und Tieftemperaturverhalten lokalisieren.

<sup>9</sup>Das Programm erzeugt und diagonalisiert sukzessive immer größere Tridiagonalmatrizen und bricht ab, wenn sich der größte Eigenwert nicht mehr wesentlich ändert.