

# Molekularfeldtheorie (MFT)

Peter Silbernagel

29.06.2006

Motivation

Anwendungen der MFT

MFT-Herleitung mittels Variationsansatz und Anwendung

Grenzen der Anwendung der MFT

# Motivation

- ▶ Meisten Probleme nur unter Berücksichtigung von Wechselwirkungen formulierbar

# Motivation

- ▶ Meisten Probleme nur unter Berücksichtigung von Wechselwirkungen formulierbar
- ▶ Diese Probleme sind i.A. nicht mehr exakt lösbar

# Motivation

- ▶ Meisten Probleme nur unter Berücksichtigung von Wechselwirkungen formulierbar
- ▶ Diese Probleme sind i.A. nicht mehr exakt lösbar
- ▶ MFT als einfachste Näherung in Systemen mit Wechselwirkung

# Anwendungen der MFT

- ▶ MFT des Ising-Modell.

# Anwendungen der MFT

- ▶ MFT des Ising-Modell.
- ▶ Van der Waals Gas als Konsequenz einer MFT

# Anwendungen der MFT

- ▶ MFT des Ising-Modell.
- ▶ Van der Waals Gas als Konsequenz einer MFT
- ▶ MFT der Perkolation



# MFT des Ising-Modell (heuristische Herleitung)

- ▶ Ausgangsgleichung bildet der bekannte Hamilton-Operator

$$H = - \sum_{i,j} J_{i,j} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

# MFT des Ising-Modell (heuristische Herleitung)

- ▶ Ausgangsgleichung bildet der bekannte Hamilton-Operator

$$H = - \sum_{i,j} J_{i,j} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

- ▶ Im Ising-Modell macht man nun die Annahme, dass in der Doppelsumme nur die nächsten Nachbarn berücksichtigt werden sollen, d.h. es gilt

$$J_{ij} = \begin{cases} J & \text{nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

# MFT als Folge des Problems der Lösbarkeit

- ▶ Das entsprechende statistische Problem lautet dann:

$$Z = Sp(\exp^{-\beta H}) = Sp(\exp(-\beta(-\sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - B \sum_i s_i)))$$

# MFT als Folge des Problems der Lösbarkeit

- ▶ Das entsprechende statistische Problem lautet dann:

$$Z = Sp(\exp^{-\beta H}) = Sp(\exp(-\beta(-\sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - B \sum_i s_i)))$$

- ▶ Das betrachtete statistische Problem ist nur im ein- und zweidimensionalen Fall exakt lösbar

# MFT als Folge des Problems der Lösbarkeit

- ▶ Das entsprechende statistische Problem lautet dann:

$$Z = Sp(\exp^{-\beta H}) = Sp(\exp(-\beta(-\sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - B \sum_i s_i)))$$

- ▶ Das betrachtete statistische Problem ist nur im ein- und zweidimensionalen Fall exakt lösbar
- ▶ Der erste Schritt zur Berücksichtigung der Wechselwirkung erhalten wir durch die MFT

# Idee der MFT des Ising-Modells

Die Näherung besteht nun darin:

- ▶ Den durch die wechselwirkenden Spins  $s_i s_j$  erzeugten fluktuierenden Anteil im Hamiltonian zu vernachlässigen

# Idee der MFT des Ising-Modells

Die Näherung besteht nun darin:

- ▶ Den durch die wechselwirkenden Spins  $s_i s_j$  erzeugten fluktuierenden Anteil im Hamiltonian zu vernachlässigen
- ▶ Betrachte dazu die Beziehung

$$s_i s_j = (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) + s_i \langle s_j \rangle + s_j \langle s_i \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

# Idee der MFT des Ising-Modells

- ▶ Unter Vernachlässigung von  $(s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle)$  erhält man den Molekularfeld-Hamiltonian direkt aus dem Ising-Hamiltonian:



## Idee der MFT des Ising-Modells

- ▶ Unter Vernachlässigung von  $(s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle)$  erhält man den Molekularfeld-Hamiltonian direkt aus dem Ising-Hamiltonian:



$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i \langle s_j \rangle + s_j \langle s_i \rangle) - B \sum_i s_i + E_0$$

## Idee der MFT des Ising-Modells

- ▶ Unter Vernachlässigung von  $(s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle)$  erhält man den Molekularfeld-Hamiltonian direkt aus dem Ising-Hamiltonian:

- ▶ 
$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i \langle s_j \rangle + s_j \langle s_i \rangle) - B \sum_i s_i + E_0$$

- ▶ wobei: 
$$E_0 = \sum_{\langle i,j \rangle} J \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

## Idee der MFT des Ising-Modells

- ▶ Unter Vernachlässigung von  $(s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle)$  erhält man den Molekularfeld-Hamiltonian direkt aus dem Ising-Hamiltonian:



$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i \langle s_j \rangle + s_j \langle s_i \rangle) - B \sum_i s_i + E_0$$



$$\text{wobei: } E_0 = \sum_{\langle i,j \rangle} J \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

- ▶ Im folgenden können wir  $E_0$  vernachlässigen

# Idee der MFT des Ising-Modells

- ▶ Die vorherige Gleichung lässt sich dann wie folgt vereinfachen:

$$H = - \sum_i (zJ \langle s_j \rangle + B) s_i$$

wobei  $z$  die sogenannte Koordinationszahl sein soll

## Idee der MFT des Ising-Modells

- ▶ Die vorherige Gleichung lässt sich dann wie folgt vereinfachen:

$$H = - \sum_i (zJ \langle s_j \rangle + B) s_i$$

wobei  $z$  die sogenannte Koordinationszahl sein soll

- ▶ Weiter können wir die Gleichung vereinfachen, wenn wir berücksichtigen gilt:  
 $\langle s(j) \rangle = \langle s \rangle$  für alle  $j = 1, 2, \dots, N$ , so dass zusammenfassend gilt:

## Idee der MFT des Ising-Modells

- ▶ Die vorherige Gleichung lässt sich dann wie folgt vereinfachen:

$$H = - \sum_i (zJ \langle s_j \rangle + B) s_i$$

wobei  $z$  die sogenannte Koordinationszahl sein soll

- ▶ Weiter können wir die Gleichung vereinfachen, wenn wir berücksichtigen gilt:  
 $\langle s(j) \rangle = \langle s \rangle$  für alle  $j = 1, 2, \dots, N$ , so dass zusammenfassend gilt:



$$H = - \sum_i (zJ \langle s \rangle + B) s_i$$

# Idee der MFT des Ising-Modells

- ▶ Obige Gleichung beschreibt den Hamiltonian eines Systems von  $N$  voneinander unabhängigen Spins, und jeder dieser Spins wechselwirkt mit dem effektiven Feld  $zJ \langle s \rangle + B$

# Thermodynamik des Ising-Modells in der MFT

- ▶ Jetzt kann man  $Z$  als Produkt von  $N$  1-Spin Zustandssummen  $z_0$  beschreiben, denn es gilt:

$$Z = Sp(\exp^{-\beta H}) = \prod_{i=1}^N (\sum \exp(+\beta((zJ + B)s_i))) = z_0^N$$



# Thermodynamik des Ising-Modells in der MFT

- ▶ Jetzt kann man  $Z$  als Produkt von  $N$  1-Spin Zustandssummen  $z_0$  beschreiben, denn es gilt:

$$Z = Sp(\exp^{-\beta H}) = \prod_{i=1}^N (\sum \exp(+\beta((zJ + B)s_i))) = z_0^N$$



$$\begin{aligned} \text{wobei: } z_0 &= Sp(\exp(+\beta(zJ \langle s \rangle + Bs))) \\ &= 2 \cosh(+\beta(zJ \langle s \rangle + Bs)) \end{aligned}$$

# Thermodynamik des Ising-Modells in der MFT

- ▶ Jetzt können wir den Erwartungswert  $\langle s \rangle$  bestimmen:

$$\begin{aligned}\langle s \rangle &= \frac{Sp(s \exp(-\beta(zJ \langle s \rangle + B)s))}{z_0} \\ &= \tanh(-\beta(zJ \langle s \rangle + B))\end{aligned}$$

# Thermodynamik des Ising-Modells in der MFT

- ▶ Jetzt können wir den Erwartungswert  $\langle s \rangle$  bestimmen:

$$\begin{aligned}\langle s \rangle &= \frac{Sp(s \exp(-\beta(zJ \langle s \rangle + B)s))}{z_0} \\ &= \tanh(-\beta(zJ \langle s \rangle + B))\end{aligned}$$

- ▶ Die Gleichung beschreibt also eine implizite Relation für  $\langle s \rangle$  und wegen  $m = \langle s \rangle$  folgt somit:

$$m = \tanh(-\beta(zJm + B))$$

# Zusammenfassung

- ▶ Durch Vernachlässigung der Fluktuationen im Hamilton-Operator und Ausnutzung der Homogenität des Raumes erhalten wir aus dem komplizierten Ising-Hamiltonian ein behandelbares System  $N$  unabhängiger Teilchen

# Zusammenfassung

- ▶ Durch Vernachlässigung der Fluktuationen im Hamilton-Operator und Ausnutzung der Homogenität des Raumes erhalten wir aus dem komplizierten Ising-Hamiltonian ein behandelbares System  $N$  unabhängiger Teilchen
- ▶ Wir haben eine implizite Beziehung für die Magnetisierung  $m$  erhalten

# Van der Waals-Gas als Beispiel einer MFT

- ▶ Auch das Van der Waals-Modell für reale Gase lässt sich im Rahmen einer MFT herleiten:

# Van der Waals-Gas als Beispiel einer MFT

- ▶ Auch das Van der Waals-Modell für reale Gase lässt sich im Rahmen einer MFT herleiten:
- ▶ Zur Vereinfachung des Systems nimmt man an, dass die gesamte potentielle Energie des Systems der Summe über alle möglichen Paarwechselwirkungen  $W(|r_i - r_j|)$  entspricht.

# Van der Waals-Gas als Beispiel einer MFT

- ▶ Auch das Van der Waals-Modell für reale Gase lässt sich im Rahmen einer MFT herleiten:
- ▶ Zur Vereinfachung des Systems nimmt man an, dass die gesamte potentielle Energie des Systems der Summe über alle möglichen Paarwechselwirkungen  $W(|r_i - r_j|)$  entspricht.
- ▶ Die Hamilton-Funktion lautet dann:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + 1/2 \sum_{i,j} W(|r_i - r_j|)$$



# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Mit den gemachten Annahmen lautet die entsprechende Zustandssumme dann:

$$Z = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d\Omega \exp\left(-\beta \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + 1/2 \sum_{i,j} W(|r_i - r_j|)\right)$$

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Mit den gemachten Annahmen lautet die entsprechende Zustandssumme dann:

$$Z = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d\Omega \exp\left(-\beta \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + 1/2 \sum_{i,j} W(|r_i - r_j|)\right)$$

- ▶ Mit  $\int d\Omega$  entspricht  $\int d^3 p_1 \dots \int d^3 p_N \int d^3 r_1 \dots \int d^3 r_N$

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Mit den gemachten Annahmen lautet die entsprechende Zustandssumme dann:

$$Z = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d\Omega \exp\left(-\beta \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + 1/2 \sum_{i,j} W(|r_i - r_j|)\right)$$

- ▶ Mit  $\int d\Omega$  entspricht  $\int d^3 p_1 \dots \int d^3 p_N \int d^3 r_1 \dots \int d^3 r_N$
- ▶ Problem: Die Berechnung dieser Zustandssumme  $Z$  ist in der Regel wegen der Form von  $W(|r_i - r_j|)$  nicht exakt lösbar.

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Mit den gemachten Annahmen lautet die entsprechende Zustandssumme dann:

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int d\Omega \exp\left(-\beta \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + 1/2 \sum_{i,j} W(|r_i - r_j|)\right)$$

- ▶ Mit  $\int d\Omega$  entspricht  $\int d^3 p_1 \dots \int d^3 p_N \int d^3 r_1 \dots \int d^3 r_N$
- ▶ Problem: Die Berechnung dieser Zustandssumme  $Z$  ist in der Regel wegen der Form von  $W(|r_i - r_j|)$  nicht exakt lösbar.
- ▶ Die MFT stellt nun wieder einen ersten Schritt dar sich dieser Wechselwirkung zu nähern

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Zur Lösung mittels der MFT werden die Wechselwirkungen zwischen den Molekülen jetzt durch eine Potentialfunktion  $\Phi(\vec{r})$  beschrieben wird

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Zur Lösung mittels der MFT werden die Wechselwirkungen zwischen den Molekülen jetzt durch eine Potentialfunktion  $\Phi(\vec{r})$  beschrieben wird
- ▶ Das ursprüngliche Viel-Teilchen Problem reduziert sich auf ein Ein-Teilchen Problem ( nämlich dem Problem der Einteilchenbewegung in einem Potentialfeld ( $\Phi(\vec{r})$ ) )

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Zur Lösung mittels der MFT werden die Wechselwirkungen zwischen den Molekülen jetzt durch eine Potentialfunktion  $\Phi(\vec{r})$  beschrieben wird
- ▶ Das ursprüngliche Viel-Teilchen Problem reduziert sich auf ein Ein-Teilchen Problem ( nämlich dem Problem der Einteilchenbewegung in einem Potentialfeld ( $\Phi(\vec{r})$ ) )
- ▶ Für die Zustandssumme erhält man dann:

$$Z = \frac{z_0^N}{N!}; \quad z_0 = \frac{1}{h^3} \int d^3 p \int d^3 r \exp(-\beta(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \phi(\vec{r})))$$

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Weiter ergibt sich daraus:

$$z_0 = \frac{1}{h^3} (2\pi m T)^{3/2} \int d^3 r \exp(-\beta(\phi(\vec{r})))$$



# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Weiter ergibt sich daraus:

$$z_0 = \frac{1}{h^3} (2\pi mT)^{3/2} \int d^3r \exp(-\beta(\phi(\vec{r})))$$

- ▶ Um diese Gleichung komplett auszurechnen müssen wir jetzt noch die Form von  $\Phi(\vec{r})$  festlegen:

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \infty & \text{falls } r \in V_0 < V \\ -\frac{aN}{V} & \text{sonst} \end{cases}$$

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Damit folgt dann:

$$z_0 = \frac{1}{h^3} (2\pi m T)^{3/2} (V - Nb) \exp\left(\frac{aN}{TV}\right)$$

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Damit folgt dann:

$$z_0 = \frac{1}{h^3} (2\pi m T)^{3/2} (V - Nb) \exp\left(\frac{aN}{TV}\right)$$

- ▶ Und damit für die freie Energie und den Druck :

$$F = -k_B T \ln(Z); \quad p = -\frac{\partial F}{\partial V} \quad \rightarrow \quad \left(p + \frac{aN^2}{V^2}\right)(V - Nb) = Nk_B T$$

# Problem der Berechenbarkeit

- ▶ Damit folgt dann:

$$z_0 = \frac{1}{h^3} (2\pi m T)^{3/2} (V - Nb) \exp\left(\frac{aN}{TV}\right)$$

- ▶ Und damit für die freie Energie und den Druck :

$$F = -k_B T \ln(Z); \quad p = -\frac{\partial F}{\partial V} \quad \rightarrow \quad \left(p + \frac{aN^2}{V^2}\right)(V - Nb) = Nk_B T$$

- ▶ Also das van der Waals-Modell.

# Zusammenfassung

- ▶ Das van der Waals-Modell ist unter bestimmten Annahmen im Rahmen der MFT herleitbar

# Zusammenfassung

- ▶ Das van der Waals-Modell ist unter bestimmten Annahmen im Rahmen der MFT herleitbar
- ▶ Zur Herleitung haben wir dabei ausgenutzt:
  - ▶ Berücksichtigung der Paarwechselwirkung durch ein unendliches Potential
  - ▶ Form des Potentials orientiert sich am Lennard-Jones Potential

## Erinnerung: Perkolation (Idee)

- ▶ Das System besteht aus einem Punktegitter, wobei die Punkte miteinander verbunden werden können

## Erinnerung: Perkolation (Idee)

- ▶ Das System besteht aus einem Punktegitter, wobei die Punkte miteinander verbunden werden können
- ▶ Die Besetzungswahrscheinlichkeit  $p$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass zwei beliebig herausgegriffene und benachbarte Gitterpunkte durch eine Brücke miteinander verbunden sind



## Erinnerung: Perkolation (Idee)

- ▶ Das System besteht aus einem Punktegitter, wobei die Punkte miteinander verbunden werden können
- ▶ Die Besetzungswahrscheinlichkeit  $p$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass zwei beliebig herausgegriffene und benachbarte Gitterpunkte durch eine Brücke miteinander verbunden sind
- ▶ Aufgabe der Perkolationstheorie ist jetzt die Perkolationsschwelle  $p_c$  vorherzusagen

## Erinnerung: Perkolation (Idee)

- ▶ Bezeichnen wir jetzt noch mit  $P_i$  die Wahrscheinlichkeit, dass die  $i$ -te Brücke zu einem unendlichen Cluster gehört, so ergibt sich für dieses Gittersystem folgende Gleichung:

## Erinnerung: Perkolation (Idee)

- ▶ Bezeichnen wir jetzt noch mit  $P_i$  die Wahrscheinlichkeit, dass die  $i$ -te Brücke zu einem unendlichen Cluster gehört, so ergibt sich für dieses Gittersystem folgende Gleichung:



$$1 - P_i = \prod_j (1 - pP_j) \quad \text{wobei } j \text{ nächster Brückennachbar}$$

# MFT der Perkolation

- ▶ In der MFT machen wir jetzt die Annahme, dass alle  $P_i$  voneinander unabhängig sind und dass alle  $P_i$  nehmen denselben Wert an, d.h. es gilt :  $P_i = P$ .

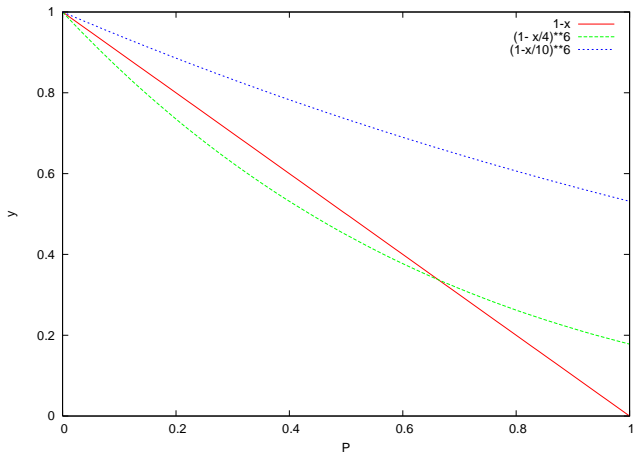
# MFT der Perkolation

- ▶ In der MFT machen wir jetzt die Annahme, dass alle  $P_i$  voneinander unabhängig sind und dass alle  $P_i$  nehmen denselben Wert an, d.h. es gilt :  $P_i = P$ .
- ▶ Damit erhält man die Gleichung

$$1 - P = (1 - pP)^z \quad \text{wobei } z \text{ die Koordiantionszahl}$$

# MFT der Perkolation

- Für diese Gleichung gibt es stets eine nichttriviale Lösung für  $p > p_c = \frac{1}{2}$  dies kann man auch graphisch veranschaulichen:



# MFT der Perkolation

- ▶ Auch im eindimensionalen Fall erhält man eine nichttriviale Lösung für  $p_c$  obwohl nur  $p_c = 1$  gelten kann

# MFT der Perkolation

- ▶ Auch im eindimensionalen Fall erhält man eine nichttriviale Lösung für  $p_c$  obwohl nur  $p_c = 1$  gelten kann
- ▶ Ferner erhalten wir aus der Gleichung  $1 - P = (1 - pP)^z$  auch, dass die genaue Gittergeometrie nicht berücksichtigt wird



# Zusammenfassung

- ▶ Zur Herleitung der impliziten Beziehung für  $P$  die in der MFT gilt haben wir hier als Näherung die Unabhängigkeit und Gleichheit der verschiedenen  $P_i$  benutzt

# Zusammenfassung

- ▶ Zur Herleitung der impliziten Beziehung für  $P$  die in der MFT gilt haben wir hier als Näherung die Unabhängigkeit und Gleichheit der verschiedenen  $P_i$  benutzt
- ▶ Man sieht an den bisherigen Anwendungen der MFT in den Beispielen, dass die MFT kein bestimmtes Rezept für die Vorgehensweise liefert. Die MFT ist bloß ein Konzept: Die Berücksichtigung der Wechselwirkung in einfachster Näherung

# Zusammenfassung

- ▶ Zur Herleitung der impliziten Beziehung für  $P$  die in der MFT gilt haben wir hier als Näherung die Unabhängigkeit und Gleichheit der verschiedenen  $P_i$  benutzt
- ▶ Man sieht an den bisherigen Anwendungen der MFT in den Beispielen, dass die MFT kein bestimmtes Rezept für die Vorgehensweise liefert. Die MFT ist bloß ein Konzept: Die Berücksichtigung der Wechselwirkung in einfachster Näherung
- ▶ Dennoch kann man die Idee der MFT mathematisch herleiten!

# Idee der Herleitung der MFT mittels Variationalansatz

- ▶ 1.: Ausgangspunkt ist die Zustandssumme für das zu untersuchende statistische Problem:

# Idee der Herleitung der MFT mittels Variationalansatz

- ▶ 1.: Ausgangspunkt ist die Zustandssumme für das zu untersuchende statistische Problem:



$$Z = \sum_s \exp^{-\beta H(s)}$$

Wobei  $s$  die Menge der Konfigurationen des Systems beschreibt

# Idee der Herleitung der MFT mittels Variationalansatz

- ▶ 1.: Ausgangspunkt ist die Zustandssumme für das zu untersuchende statistische Problem:



$$Z = \sum_s \exp^{-\beta H(s)}$$

Wobei  $s$  die Menge der Konfigurationen des Systems beschreibt

- ▶ 2.: Man zerlegt nun den Ausgangs-Hamiltonian  $H[s]$  in zwei Anteile:  $H_0$  und  $H_1 = H - H_0$  wobei  $H_0$  von einem Variationsparameter  $\lambda$  abhängt und die Zustandssumme von  $H_0$  kann exakt berechnet werden.

# Idee der Herleitung der MFT mittels Variationalansatz

- ▶ 3.: Es gilt die sogenannte Bogoliubov-Ungleichung für die freie Energie die besagt:

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0$$

# Idee der Herleitung der MFT mittels Variationalansatz

- ▶ 3.: Es gilt die sogenannte Bogoliubov-Ungleichung für die freie Energie die besagt:

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0$$

- ▶  $\langle H_1 \rangle_0$  erhält man dabei wie folgt



# Idee der Herleitung der MFT mittels Variationalansatz

- ▶ 3.: Es gilt die sogenannte Bogoliubov-Ungleichung für die freie Energie die besagt:

$$F \leq F_0 + \langle H_1 \rangle_0$$

- ▶  $\langle H_1 \rangle_0$  erhält man dabei wie folgt
- ▶

$$\langle H_1 \rangle_0 = \sum_s P_0(s) \exp[-\beta(H_1)] \quad \text{wobei } P_0(s) = \frac{\exp[-\beta(H_0(s))]}{Z_0}$$

# Idee der Herleitung der MFT mittels Variationalansatz

- ▶ 4.: Jetzt kann man  $\langle H_1 \rangle_0$  berechnen

# Idee der Herleitung der MFT mittels Variationalansatz

- ▶ 4.: Jetzt kann man  $\langle H_1 \rangle_0$  berechnen
- ▶ 5.: Da der gesamte Ausdruck  $H_0, \langle H_1 \rangle_0$  und damit auch  $F_0$  vom Variationsparameter  $\lambda$  abhängen, kann man dann für diesen das Minimum von  $F_0 + \langle H_1 \rangle_0$  durch ableiten erhalten. Dieses  $F(\lambda_{min})$  wird dann als unser gesuchtes  $F$  angenommen.

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Erstens entspricht dabei der normalen kanonischen Zustandssumme des Ising-Modells:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - B \sum_i s_i$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Erstens entspricht dabei der normalen kanonischen Zustandssumme des Ising-Modells:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - B \sum_i s_i$$

- ▶ zu 2.: Wir wählen als  $H_0 = -\lambda \sum_{i=1}^N s_i$ , wobei  $\lambda$  der Variationsparameter ist. Die Zustandssumme  $H_0$  lautet dann:

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Erstens entspricht dabei der normalen kanonischen Zustandssumme des Ising-Modells:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - B \sum_i s_i$$

- ▶ zu 2.: Wir wählen als  $H_0 = -\lambda \sum_{i=1}^N s_i$ , wobei  $\lambda$  der Variationsparameter ist. Die Zustandssumme  $H_0$  lautet dann:



$$Z_0(\lambda) = (2 \cosh(\beta\lambda))^N$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Wie beim Ising-Modell leitet man weiter her:

$$\langle s \rangle_0 = \tanh(\beta\lambda)$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Wie beim Ising-Modell leitet man weiter her:

$$\langle s \rangle_0 = \tanh(\beta\lambda)$$

- ▶ zu 4.: Der verbleibende Teil des Hamiltonians  $H = H_0 + H_1$  ist gegeben durch:

$$H_1 = - \sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - (\lambda - B) \sum_i s_i$$



# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Wie beim Ising-Modell leitet man weiter her:

$$\langle s \rangle_0 = \tanh(\beta\lambda)$$

- ▶ zu 4.: Der verbleibende Teil des Hamiltonians  $H = H_0 + H_1$  ist gegeben durch:

$$H_1 = - \sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - (\lambda - B) \sum_i s_i$$

- ▶ Bei der Berechnung von  $\langle H_1 \rangle_0$  kann man jetzt verwenden, dass gilt  $\langle s_i s_j \rangle = \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Der Beitrag des ersten Faktors von  $\langle H_1 \rangle_0$  lautet damit:

$$1/2NzJ \langle s \rangle_0^2 = 1/2NzJ \tanh^2(\beta\lambda)$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Der Beitrag des ersten Faktors von  $\langle H_1 \rangle_0$  lautet damit:

$$1/2NzJ \langle s \rangle_0^2 = 1/2NzJ \tanh^2(\beta\lambda)$$

- ▶ Zu 3.: Insgesamt erhalten wir damit für die obere Schranke von F:

$$F_{VAR} = N\left(-\frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh(\beta\lambda)) - 1/2zJ \tanh^2(\beta\lambda) + (\lambda - B) \tanh(\beta\lambda)\right)$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ zu 5.: Das Minimum erhalten wir nun durch Ableiten nach  $\lambda$  :

$$\lambda_{min} - B = zJ \tanh(\beta\lambda_{min})$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ zu 5.: Das Minimum erhalten wir nun durch Ableiten nach  $\lambda$  :

$$\lambda_{min} - B = zJ \tanh(\beta\lambda_{min})$$

- ▶ und damit die freie Energie:

$$F_{VAR} = -\frac{N}{\beta} \ln(2 \cosh(\beta\lambda_{min})) + \frac{N(\lambda_{min} - B)}{2zJ}$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Aus  $F_{VAR}$  ergibt sich dann die Magnetisierung des Systems wie folgt:

$$m = \frac{\partial F}{\partial \lambda} = \frac{\lambda_{min} - B}{zJ}$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Aus  $F_{VAR}$  ergibt sich dann die Magnetisierung des Systems wie folgt:

$$m = \frac{\partial F}{\partial \lambda} = \frac{\lambda_{min} - B}{zJ}$$

- ▶ Insgesamt folgt dann

$$m = \tanh(\beta(zJm + B))$$

# Veranschaulichung am Ising-Modell

- ▶ Aus  $F_{VAR}$  ergibt sich dann die Magnetisierung des Systems wie folgt:

$$m = \frac{\partial F}{\partial \lambda} = \frac{\lambda_{min} - B}{zJ}$$

- ▶ Insgesamt folgt dann

$$m = \tanh(\beta(zJm + B))$$

- ▶ was der bekannten impliziten Gleichung für das Ising-Modell in der MF-Näherung entspricht



# Zusammenfassung

- ▶ Wie erwähnt liefert die Herleitung der MFT mittels des Variationalansatzes eine geschlossene Begründung der MFT

# Zusammenfassung

- ▶ Wie erwähnt liefert die Herleitung der MFT mittels des Variationalansatzes eine geschlossene Begründung der MFT
- ▶ Der wichtigste Schritt war dabei die Forderung dass die Zustandssumme von  $H_0$  exakt berechenbar ist denn nur so können wir die Bogoliubov-Gleichung auch ausnutzen

# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶ Aus der Diskussion des 1.dim Ising-Modell kennen wir die Magnetisierung:

$$m = \langle s \rangle = \frac{\sinh(\beta(B))}{\sqrt{\cosh(\beta B)^2 - 2 \exp(-2\beta J) \sinh(2\beta J)}}$$

# Grenzen der Anwendung der MFT

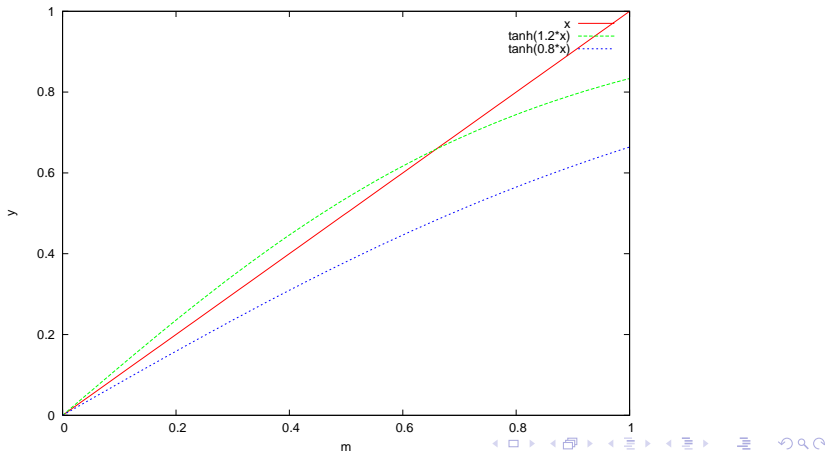
- ▶ Aus der Diskussion des 1.dim Ising-Modell kennen wir die Magnetisierung:

$$m = \langle s \rangle = \frac{\sinh(\beta(B))}{\sqrt{\cosh(\beta B)^2 - 2 \exp(-2\beta J) \sinh(2\beta J)}}$$

- ▶ Es gibt keine kritische Temperatur unterhalb derer eine spontane Magnetisierung entstehen könnte somit gibt es auch keinen Phasenübergang.

# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶ Diese Tatsache widerspricht aber unserer Feststellung für die MFT des 1. dim Ising Modells, wie man anhand der Lösung der Impliziten Gleichung der MFT des Ising-Modells feststellen kann



# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶ Der kritische Wert den  $\beta$  dabei übersteigen muss ist  $\beta_c$ , wobei gilt:

$$\beta_c zJ = 1$$

# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶  $\beta_c$  existiert für jede Dimension, weshalb auch stets eine nichttriviale Lösung der impliziten Gleichung der MFT des Ising-Modells und damit ein Phasenübergang möglich ist.

# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶ Ferner liefert die MFT für  $d = 2$  bzw.  $d = 3$  für eine quadratische bzw. kubische Anordnung:

$$\beta_{CMFT} = \frac{1}{4J} \quad \text{bzw.} \quad \beta_{CMFT} = \frac{1}{6J} \quad \text{für } d = 2 \quad \text{bzw.} \quad d = 3$$



# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶ Ferner liefert die MFT für  $d = 2$  bzw.  $d = 3$  für eine quadratische bzw. kubische Anordnung:

$$\beta_{CMFT} = \frac{1}{4J} \quad \text{bzw.} \quad \beta_{CMFT} = \frac{1}{6J} \quad \text{für } d = 2 \quad \text{bzw.} \quad d = 3$$

- ▶ Die numerischen Werte lauten hingegen:

$$\beta_c = \frac{0.4407}{J} \quad \text{bzw.} \quad \beta_c = \frac{0.222}{J} \quad \text{für } d = 2 \quad \text{bzw.} \quad d = 3$$

# Grenzen der Anwendung der MFT

Wie man sieht gilt in den bisher behandelten Fällen stets:

▶  $\beta_{CMFT} < \beta_c$  und somit auch  $T_{CMFT} > T_c$

# Grenzen der Anwendung der MFT

Wie man sieht gilt in den bisher behandelten Fällen stets:

- ▶  $\beta_{CMFT} < \beta_c$  und somit auch  $T_{CMFT} > T_c$
- ▶ Dies kann man darauf zurückführen, dass in der MFT die Fluktuationen vernachlässigt sind

# Grenzen der Anwendung der MFT

Wie man sieht gilt in den bisher behandelten Fällen stets:

- ▶  $\beta_{CMFT} < \beta_c$  und somit auch  $T_{CMFT} > T_c$
- ▶ Dies kann man darauf zurückführen, dass in der MFT die Fluktuationen vernachlässigt sind
- ▶ Weiter wird in der MFT die tatsächliche freie Energie des statistischen Problems stets überschätzt.

# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶ Ein weiteres Problem der MFT besteht darin das i.A. die Dimension des statistischen Problems nur ungenügend Rechnung getragen wird.

# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶ Ein weiteres Problem der MFT besteht darin das i.A. die Dimension des statistischen Problems nur ungenügend Rechnung getragen wird.
- ▶ Im allgemeinen ist zu erwarten, dass die Abschätzung durch die MFT für einen festen Gittertyp umso bessere Resultate liefert, je höher die Raumdimensionen des betrachteten Problems seien werden. Da die Fluktuationen mit höherer Gitterdimension abnehmen werden

# Grenzen der Anwendung der MFT

- ▶ Ein weiteres Problem der MFT besteht darin das i.A. die Dimension des statistischen Problems nur ungenügend Rechnung getragen wird.
- ▶ Im allgemeinen ist zu erwarten, dass die Abschätzung durch die MFT für einen festen Gittertyp umso bessere Resultate liefert, je höher die Raumdimensionen des betrachteten Problems seien werden. Da die Fluktuationen mit höherer Gitterdimension abnehmen werden
- ▶ Aus dem Konzept der MFT folgt auch, dass die MFT besonders für langreichweitige Wechselwirkungen die brauchbarsten Näherungen liefern, denn hier wird der Einfluss der Fluktuationen des tatsächlich wirkenden Potentials nur sehr gering sein, so dass die MFT, die diese Fluktuationen nicht berücksichtigt, hier nur geringe Fehler macht

# Literaturangaben



Binney, J. J.: *The theory of critical phenomena - an introduction to the renormalization group*, Clarendon Press, Reprint. with corr. (1993)



Nolting, Wolfgang.: *Theoretische Physik Band 6 - Statistische Physik* Vieweg-Lehrbuch, 3.verb. Aufl. (1998)