Zentralübung

Thermodynamik und Statistische Physik (T4)

Lösungsskizze Blatt 14

WiSe 2019/20

Aufgabe 1: Das Potts Modell

a) In der Basis $\{|s_i\rangle\}_{s_i=1,2,3}$ sind die Matrixelemente der Transfermatrix durch den Boltzman-Faktor bestimmt:

$$\langle s_i|T|s_{i+1}\rangle = \exp[-\beta(-2J\delta_{s_i,s_{i+1}} - 2h\delta_{s_i,1})] = \zeta^{\delta_{s_i,s_{i+1}}} z^{\delta_{s_i,1}}$$

also

$$T = \begin{pmatrix} \zeta z & z & z \\ 1 & \zeta & 1 \\ 1 & 1 & \zeta \end{pmatrix}.$$

Um die Zustandssumme zu bestimmen, rechnen wir die Eigenwerte von T. Das charakteristische Polynom kann wie folgend berechnet werden

$$\begin{aligned}
P(\lambda) &= \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & z & z \\ 1 & \zeta - \lambda & 1 \\ 1 & 1 & \zeta - \lambda \end{pmatrix} \\
&= \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & z & z \\ 1 & \zeta - \lambda & 1 \\ 0 & 1 + \lambda - \zeta & \zeta - \lambda - 1 \end{pmatrix} \\
&= \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & 2z & z \\ 1 & 1 + \zeta - \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \zeta - \lambda - 1 \end{pmatrix} \\
&= -(\lambda + 1 - \zeta) \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & 2z \\ 1 & 1 + \zeta - \lambda \end{pmatrix} \\
&= (\lambda + 1 - \zeta)\big(2z - (\zeta z - \lambda)(1 + \zeta - \lambda)\big)
\end{aligned}$$

wo in der ersten Gleichung die zweite Reihe von der dritten subtrahiert wurde, und in der zweiten Gleichung die dritte Spalte von der zweiten subtrahiert wurde. Die Eigenwerte sind

$$\begin{aligned}
\lambda_3 &= \zeta - 1 = e^{2\beta J} - 1, \\
\lambda_\pm &= \frac{1}{2}\Big(\zeta(z+1) + 1 \pm \sqrt{\big(\zeta(z+1)+1\big)^2 - 4(\zeta-1)\zeta z}\Big) \\
&= \zeta\Big(\tfrac{1}{2}(z+1) + \tfrac{\zeta^{-1}}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}\big((z+1)+\zeta^{-1}\big)^2 - (1-\zeta^{-1})z}\Big)
\end{aligned}$$

Die Zustandssumme ist dann

$$Z = \mathrm{tr}(T^N) = \lambda_3^N + \lambda_+^N + \lambda_-^N.$$

b) Es gilt

$$F = -kT \ln Z = -kT \log\left(\lambda_3^N + \lambda_+^N + \lambda_-^N\right)$$

Im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ ist dann

$$\frac{F}{N} \simeq -\frac{kT}{N} \log\left(\lambda_+^N\right) = -kT \log \lambda_+.$$

c) Die Verallgemeinerung zu $s_i \in \{1, \dots, q\}$ ist einfach, denn die erste Formel aus a) gilt immernoch. Dann ist in der Basis $\{|s_i\rangle\}_{s_i=1,\dots,q}$

$$T = \begin{pmatrix} \zeta z & z & & \cdots & z \\ 1 & \zeta & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & & 1 & \zeta \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte berechnen wir dann, analog zu a), indem wir bei $\det(T - \lambda)$:

1. Die zweite Reihe von der dritten sowie von alle weiteren Reihen subtrahieren.
2. Die dritte Spalte sowie alle weiteren Spalten zur zweiten addieren.

Wir erhalten:

$$\begin{aligned} P(\lambda) &= \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & z(q-1) & z & \cdots & z \\ 1 & \zeta - \lambda + q - 2 & 1 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & \zeta - \lambda - 1 & \cdot & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & \zeta - \lambda - 1 \end{pmatrix} \\ &= (\zeta - \lambda - 1)^{q-2} \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & z(q-1) \\ 1 & \zeta - \lambda + q - 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und somit haben wir

$$\begin{aligned} \lambda &= \zeta - 1 \qquad (q-2)\text{-mal entartet}, \\ \lambda_\pm &= \frac{1}{2}\Big(\zeta(z+1) + q - 2 \pm \sqrt{\big(\zeta(z+1) + q - 2\big)^2 - 4(\zeta - 1)(\zeta + q - 1)z}\Big). \end{aligned}$$

Aufgabe 2: Korrelationslänge für das Ising-Modell

a) Für jede ONB basis $\{|s\rangle\}$ gilt $\sum_s |s\rangle\langle s| = 1$. Wir haben

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_1,\dots,s_N} e^{\beta J(s_1 s_2 + \dots + s_{N-1}s_N + s_N s_1)} \\ &= \sum_{s_1,\dots,s_N} \langle s_1|T|s_2\rangle \cdots \langle s_{N-1}|T|s_N\rangle \langle s_N|T|s_1\rangle \\ &= \sum_{s_1} \langle s_1|T^N|s_1\rangle \\ &= \operatorname{tr}(T^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \end{aligned}$$

wo in der Basis $\{|\pm 1\rangle\}$

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}.$$

Wir diagonalizieren T indem wir in einer neuen Basis rotieren wie $T = SDS^{-1}$ mit diagonale Matrix der Eigenwerte und Matrix der Eigenvektoren

$$D = \begin{pmatrix} 2\cosh\beta J & 0 \\ 0 & 2\sinh\beta J \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \qquad S = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Analog rechnen wir

$$\begin{aligned} Z\,\langle \hat{s}_i \hat{s}_{i+r}\rangle &= \sum_{\{s_j\}} \langle s_1|T|s_2\rangle \cdots \langle s_{i-1}|T|s_i\rangle\, \hat{s}_i\, \langle s_i|T|s_{i+1}\rangle \cdots \\ &\qquad \cdots \langle s_{i+r-1}|T|s_{i+r}\rangle\, \hat{s}_{i+r}\, \langle s_{i+r}|T|s_{i+r+1}\rangle \cdots \langle s_{N-1}|T|s_N\rangle \langle s_N|T|s_1\rangle \\ &= \operatorname{tr}\big(T^{i-1}\sigma_3 T^r \sigma_3 T^{N-i-r+1}\big), \end{aligned}$$

wo wir benutzt haben, dass in der ONB $\{|\pm 1\rangle\}$

$$\sum_{s=\pm 1} |s\rangle\, \hat{s}\, \langle s| = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Um die Spur zu berechnen, rotieren durch die diagonalizierende Matrix S; es gilt $\sigma_3 = S\sigma_1 S^{-1}$ also haben wir

$$\begin{aligned}
Z\,\langle \hat{s}_i \hat{s}_{i+r} \rangle &= \operatorname{tr}\left(D^{i-1}\sigma_1 D^r \sigma_1 D^{N-i-r+1}\right) \\
&= \operatorname{tr}\left[\begin{pmatrix} \lambda_+^{i-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{i-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_+^{r} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{r} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_+^{N-i-r+1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N-i-r+1} \end{pmatrix}\right] \\
&= \operatorname{tr}\left[\begin{pmatrix} \lambda_+^{i-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{i-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \lambda_-^{r} \\ \lambda_+^{r} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \lambda_-^{N-i-r+1} \\ \lambda_+^{N-i-r+1} & 0 \end{pmatrix}\right] \\
&= \operatorname{tr}\left[\begin{pmatrix} \lambda_+^{i-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{i-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_-^{r}\lambda_+^{N-i-r+1} & 0 \\ 0 & \lambda_+^{r}\lambda_-^{N-i-r+1} \end{pmatrix}\right] \\
&= \lambda_-^r \lambda_+^{N-r} + \lambda_+^r \lambda_-^{N-r}.
\end{aligned}$$

Somit ist

$$\langle \hat{s}_i \hat{s}_{i+r} \rangle = \frac{\lambda_-^r \lambda_+^{N-r} + \lambda_+^r \lambda_-^{N-r}}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} = \frac{\sinh^r(\beta J)\cosh^{N-r}(\beta J) + \cosh^r(\beta J)\sinh^{N-r}(\beta J)}{\cosh^N(\beta J) + \sinh^N(\beta J)}.$$

b) Es gilt, dass

$$\xi = -\frac{r}{\log \langle \hat{s}_i \hat{s}_{i+r} \rangle}.$$

Der explizite Ausdruck ist im Limes großer Kette einfacher. Es gilt $\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^M \to 0$ für $M \gg 1$. Im Limes einer großen Kette, wo $N \gg r$ und $N \gg 1$ finden wir also

$$\begin{aligned}
\langle \hat{s}_i \hat{s}_{i+r} \rangle &= \frac{\lambda_-^r \lambda_+^{N-r}}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} + \frac{\lambda_+^r \lambda_-^{N-r}}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \\
&= \frac{\lambda_-^r \lambda_+^{-r}}{1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N} + \frac{\lambda_+^{-(N-r)} \lambda_-^{N-r}}{1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N} \\
&= \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^r + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)
\end{aligned}$$

Somit ist dann

$$\xi = \frac{1}{\log \lambda_+ - \log \lambda_-}.$$

Bei Fragen E-Mail an *tabler.alexander@physik.uni-muenchen.de*