

**Fakultät für Physik und Astronomie
Universität Heidelberg**

Bachelorarbeit in Physik
eingereicht von

Jacob Fronk

am

21. Juli 2015

Spontane Magnetisierung in drei Dimensionen bei stark asymmetrischer Kopplung

Diese Bachelorarbeit wurde eingereicht von Jacob Fronk am
Institut für theoretische Physik in Heidelberg
Unter der Betreuung von
Prof. Manfred Salmhofer

Abstract

Untersucht wird die Möglichkeit spontaner Magnetisierung in unendlich ausgedehnten einfach kubischen Gittern mit nächster-Nachbar-Kopplung und kontinuierlichem Spin.

Hierbei wird ein besonderes Augenmerk auf Systeme mit stark asymmetrischer Kopplung gelegt, also Systeme mit gewöhnlicher Bindung in zwei Dimensionen aber nur sehr schwacher Bindung in der dritten Dimension. Diese sind von besonderem Interesse da es in zwei Dimensionen, wie N. D. Mermin und H. Wagner zeigten, keine spontane Magnetisierung bei endlicher Temperatur gibt, während in drei Dimensionen nur obere Schranken für die Magnetisierung angegeben werden können.

Daher werden für diesen Fall, ausgehend von Arbeiten von G. Roepstorff, sowie von O. McBryan und T. Spencer, obere Schranken für die Magnetisierung im quantenmechanischen Heisenberg-Modell, sowie für die Spin-Spin-Korrelation im klassischen $O(N)$ -Modell hergeleitet.

ABSTRACT ENGLISH: TBD!

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
1.1	Grundlagen	3
1.1.1	Das klassische $O(N)$ -Modell	3
1.1.2	Das quantenmechanische Heisenberg-Modell	4
1.2	Das Mermin-Wagner-Theorem	4
1.3	Das McBryan-Spencer-Argument	4
1.4	Asymmetrische Kopplung in drei Dimensionen	8
2	Magnetisierung im Heisenberg-Modell	9
3	Spin-Spin-Korrelation im klassischen $O(N)$-Modell	11
4	Fazit	14

Kapitel 1

Einführung

1.1 Grundlagen

Spontane Magnetisierung, also die Ordnung der magnetischen Momente in einem Festkörper ohne ein externes Magnetfeld, ist ein Phänomen, das nicht vollständig mit Hilfe von klassischer Physik verstanden werden kann. Denn wie Niels Bohr 1911 und Hendrika Johanna van Leeuwen 1919 zeigten ist das mittlere magnetische Moment in einem klassischen statistischen System immer Null. Werner Heisenberg führte spontane Magnetisierung stattdessen in seiner Arbeit „Zur Theorie des Ferromagnetismus“ 1917 auf das Überlappen von Spinwellenfunktionen zurück. Diese Wellenfunktionen fallen exponentiell ab, weshalb die zugehörige Wechselwirkung in sehr guter Näherung als kurzreichweitig bezeichnet werden kann.

Im Folgenden wird die Betrachtung zudem auf einfach kubische Gitter (beziehungsweise dem zweidimensionalen Pendant dem quadratischen Flächengitter) eingeschränkt. Weiter werden periodische Randbedingungen angenommen, wodurch sich die Gitter einfach als $(\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d =: \Lambda_L$ beschreiben lassen. Unter diesen Bedingungen wird der Hamiltonoperator zu

$$H = \sum_{i,j \in \Lambda_L} J_{i,j} s_i \cdot s_j + \sum_{i \in \Lambda_L} h \cdot s_i \quad (1.1)$$

Dabei bezeichnen $J_{i,j}$ die Kopplungskonstante der Spins und h ein externes Magnetfeld. Aufgrund der kurzen Reichweite der Spinwellenfunktionen werden sämtliche Wechselwirkungen die nicht zu nächsten Nachbarn gehören vernachlässigt. Zudem wird die Kopplungskonstante zunächst als isotrop angenommen. Damit es zu Magnetisierung kommen kann muss sie außerdem positiv sein. Damit erhält man:

$$J_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{falls } |x_i - x_j| = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.2)$$

Und somit für den Hamiltonoperator:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} s_i \cdot s_j + \sum_{i \in \Lambda_L} h \cdot s_i \quad (1.3)$$

Dabei bezeichnet $\langle i,j \rangle$ die Summation über alle $i, j \in \Lambda_L$ mit $|x_i - x_j| = 1$.

Im Rahmen dieser Arbeit werden zwei unterschiedliche Fälle betrachtet:

1.1.1 Das klassische $O(N)$ -Modell

Hier werden die Spins als klassische N -komponentige Einheitsvektoren aufgefasst, dementsprechend werden sie über $N - 1$ Winkel parametrisiert. Der Erwartungswert einer Observablen A

ist dann gegeben durch:

$$\langle A \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \int \prod_{y \in \Lambda_L} d^{N-1} \Omega_y \exp(\beta H) A \quad (1.4)$$

Hierbei ist $\beta = \frac{1}{T}$ die inverse Temperatur und Z die Zustandssumme mit

$$Z = \int \prod_{y \in \Lambda_L} d^{N-1} \Omega_y \exp(\beta H) \quad (1.5)$$

[QUELLE]

1.1.2 Das quantenmechanische Heisenberg-Modell

Im Heisenberg-Modell sind die Spins die aus der Quantenmechanik bekannten Operatoren. Der Erwartungswert eines Operators A ist dann analog zum klassischen Fall gegeben durch:

$$\langle A \rangle_\beta = \frac{\text{tr}(\exp(\beta H) A)}{\text{tr}(\exp(\beta H))} \quad (1.6)$$

[QUELLE] $\beta = \frac{1}{T}$ bezeichnet dabei wiederum die inverse Temperatur.

In beiden Fällen ist dabei oft der Erwartungswert für ein unendlich ausgedehntes Gitter $\mathbb{Z}^d$ interessant. Diesen Erwartungswert bekommt man, sofern er existiert, als Grenzwert $L \rightarrow \infty$ aus dem Erwartungswert für Λ_L .

Einer der interessantesten Erwartungswerte ist

$$m = \lim_{|h| \rightarrow 0} |\langle s_0 \rangle_\beta| \quad (1.7)$$

Denn aufgrund der Homogenität und Isotropie des Systems ist $\langle s_0 \rangle_\beta = \langle s_x \rangle_\beta \forall x \in \Lambda_L$. Dies rechtfertigt es m als (reduzierte) Magnetisierung zu bezeichnen. Der Grenzwert $|h| \rightarrow 0$ ist dabei sehr wichtig. Denn würde man von Anfang an kein Magnetfeld anlegen, gäbe es keine bevorzugte Richtung und aus Symmetriegründen würde $m = 0$ gelten.

1.2 Das Mermin-Wagner-Theorem

N. David Mermin und Herbert Wagner zeigten 1969 folgendes zentrale Theorem:

Theorem:

Sei $d \leq 2$ und $\langle \cdot \rangle_\beta$ der Erwartungswert des Heisenberg-Modells auf $\mathbb{Z}^d$ mit nächster-Nachbar-Kopplung. Dann verschwindet die Magnetisierung $m = |\langle s_0 \rangle_\beta|$ zu jeder endlichen Temperatur β .

1.3 Das McBryan-Spencer-Argument

Vom Mermin-Wagner-Theorem gibt es auch analoge Formulierungen für das klassische $O(N)$ -Modell. Statt dieser wird hier das McBryan-Spencer-Argument ausgeführt. Anstelle der Magnetisierung wird hier die Spin-Spin-Korrelation $\langle s_x \cdot s_0 \rangle_\beta$ betrachtet. Ist die Magnetisierung von 0 verschieden, so sind auch die Spins global korreliert, geht die Korrelation zu großen $|x|$ jedoch gegen 0 so kann es auch keine Magnetisierung geben. Im Gegensatz zur Magnetisierung

ist bei der Spin-Spin-Korrelation kein externes Magnetfeld nötig da sie nur die Wechselwirkung der Spins untereinander betrachtet, nicht jedoch ihre Orientierung im Raum.

Aus diesem Grund ist das folgende Theorem von Oliver A. McBryan und Thomas Spencer aus dem Jahr 1977 äquivalent zu verschwindender Magnetisierung im zweidimensionalen $O(N)$ -Modell :

Theorem:

Sei $N \geq 2$ und $\langle \cdot \rangle_\beta$ der Erwartungswert des klassischen $O(N)$ -Modells auf $\mathbb{Z}^2$ mit nächster-Nachbar-Kopplung. (GGF. noch limit endlicher boxen periodischer RB) Dann gibt es $\forall \delta > 0$ ein β_0 , so dass $\forall \beta > \beta_0$ gilt:

$$|\langle s_x \cdot s_0 \rangle_\beta| \leq |x|^{\frac{1-\delta}{2\pi} \frac{1}{\beta}} \quad (1.8)$$

Den Beweis dieses Theorems führe ich aus, da ich ihn später in modifizierter Weise für das $O(N)$ -Modell auf $\mathbb{Z}^3$ mit asymmetrischer Kopplung benötigen werde.

Beweis:

Das Theorem wird für $N = 2$ geführt und der allgemeine $O(N)$ -Fall anschließend daraus abgeleitet.

Zunächst wird die Fundamentallösung des Laplace-Operators für ein Gitter $|\Lambda_L|$ mit endlicher Seitenlänge L und periodischen Randbedingungen gesucht:

$$(-\Delta C_L)(x) = \delta_{x,0} \quad (1.9)$$

Fouriertransformation der Gleichung ergibt:

$$2\hat{D}(k)\hat{C}_L(k) = 1 \quad (1.10)$$

mit

$$\hat{D}(k) = (1 - \cos(k_1)) + (1 - \cos(k_2)) \quad (1.11)$$

Durch Rücktransformation führt dies auf:

$$\tilde{C}_L(x) = \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{k \in \Lambda_L^* \setminus \{0\}} \frac{\exp(ik \cdot x)}{2\hat{D}(k)} \quad (1.12)$$

Offenkundig existiert $\tilde{C}_L(0)$ jedoch divergiert $\tilde{C}_L(0)$ für $L \rightarrow \infty$. Dieses Problem wird umgangen indem man

$$C_L(x) := \tilde{C}_L(x) - \tilde{C}_L(0) \quad (1.13)$$

definiert. Da sich C_L und $\tilde{C}_L$ nur um eine Konstante unterscheiden, erfüllt auch C_L die Fundamentalgleichung, und der Grenzwert $L \rightarrow \infty$ existiert $\forall x$:

$$C_L(x) = \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{k \in \Lambda_L^* \setminus \{0\}} \frac{\exp(ik \cdot x) - 1}{2\hat{D}(k)} = -\frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{k \in \Lambda_L^* \setminus \{0\}} \frac{1 - \cos(k \cdot x)}{2\hat{D}(k)} \quad (1.14)$$

In (1.11) wurde dabei $\sin(-x) = -\sin(x)$ verwendet

$$C(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} C_L(x) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{[-\pi, \pi]^2} d^2k \frac{1 - \cos(k \cdot x)}{2\hat{D}(k)} \quad (1.15)$$

Dieses Integral ist beschränkt durch:

$$C(x) \leq -\frac{1}{2\pi} \ln(|x|) \quad (1.16)$$

Wegen $N=2$ gilt $s_x = \begin{pmatrix} \cos \varphi_x \\ \sin \varphi_x \end{pmatrix}$ gilt $s_x \cdot s_0 = \cos(\varphi_0 - \varphi_x)$ und somit gilt für den Erwartungswert:

$$\langle s_x \cdot s_0 \rangle_{\beta, L} = \frac{1}{Z_L} \int \prod_{y \in \Lambda} d\varphi_y \exp\left(\beta \sum_{\langle u, v \rangle} \cos(\varphi_u - \varphi_v)\right) \cos(\varphi_0 - \varphi_x) \quad (1.17)$$

$\cos(\varphi_0 - \varphi_x)$ kann aufgrund der Antisymmetrie von $\sin(x)$ durch $\exp(i(\varphi_0 - \varphi_x))$ ersetzt werden.

Der Integralkern ist bezüglich aller φ_y analytisch. Man kann daher, sofern man die Start- und Endpunkte $-\pi$ und π nicht verändert, für jedes φ_y einen beliebigen anderen Integrationsweg in der komplexen Ebene wählen. Wählt man

$$\Gamma_y(t) = \begin{cases} -\pi + ia_y t & \text{falls } 0 \leq t < 1 \\ \pi(2t - 3) + ia_y & \text{falls } 1 \leq t \leq 2 \\ \pi + ia_y(3 - t) & \text{falls } 2 < t \leq 3 \end{cases} \quad (1.18)$$

für $0 \leq t \leq 3$ und $a_y \in \mathbb{R}$ so kann man zusätzlich noch nutzen, dass der Integralkern bezüglich aller φ_y 2π -periodisch ist, weshalb das Integral über den ersten und den letzten Wegabschnitt einander aufheben, so dass man $(\varphi_y)_{y \in \Lambda_L}$ durch $(\varphi_y + ia_y)_{y \in \Lambda_L}$ mit frei wählbaren $a_y \in \mathbb{R}$ ersetzen kann. Dieses Integral wird nun abgeschätzt durch:

$$\cos(\varphi_u + ia_u - \varphi_v - ia_v) = \cos(\varphi_u - \varphi_v) \cosh(a_u - a_v) - i \sin(\varphi_u - \varphi_v) \sinh(a_u - a_v) \quad (1.19)$$

und somit:

$$\begin{aligned} |\exp(\beta \cos(\varphi_u + ia_u - \varphi_v - ia_v))| &= \exp(\beta \cos(\varphi_u - \varphi_v) \cosh(a_u - a_v)) \\ &= \exp(\beta \cos(\varphi_u - \varphi_v)) \exp(\beta \cos(\varphi_u - \varphi_v) (\cosh(a_u - a_v) - 1)) \\ &\leq \exp(\beta \cos(\varphi_u - \varphi_v)) \exp(\beta (\cosh(a_u - a_v) - 1)) \end{aligned} \quad (1.20)$$

Weiter gilt:

$$|\exp(i(\varphi_0 + ia_0 - \varphi_x - ia_x))| = \exp(a_x - a_0) \quad (1.21)$$

Damit folgt mit Hilfe der integralen Dreiecksungleichung:

$$|\langle s_x \cdot s_0 \rangle_{\beta, L}| \leq \exp\left(\beta \sum_{\langle u, v \rangle} (\cosh(a_u - a_v) - 1)\right) \exp(a_x - a_0) \quad (1.22)$$

Durch Wahl von

$$a_y = \frac{1}{\beta} (C_L(y) - C_L(y - x)) \quad (1.23)$$

erhält man dabei für den cosh-Term:

$$\begin{aligned} |C_L(u) - C_L(v)| &\leq -\frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{k \in \Lambda_L^* \setminus \{0\}} \frac{|\cos(k \cdot u) - \cos(k \cdot v)|}{2\hat{D}(k)} \\ &= \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{k \in \Lambda_L^* \setminus \{0\}} \frac{|2 \sin(\frac{k \cdot (u+v)}{2}) \sin(\frac{k \cdot (u-v)}{2})|}{2\hat{D}(k)} \\ &\leq \frac{\pi^2}{8} \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{k \in \Lambda_L^* \setminus \{0\}} \frac{|k| |u - v|}{|k|^2} < 2 \end{aligned} \quad (1.24)$$

Für hinreichend großes L und $|u - v| = 1$. Dabei wurde im letzten Schritt der Abschätzung benutzt, dass $|2 \sin(\frac{k \cdot (u+v)}{2}) \sin(\frac{k \cdot (u-v)}{2})| \leq |k| |u - v|$ und $2\hat{D}(k) \geq \frac{8}{\pi^2} |k|^2$.

$$\Rightarrow |a_u - a_v| = \frac{1}{\beta} |C_L(u) - C_L(u - x) - C_L(v) + C_L(v - x)| \leq \frac{4}{\beta} \quad (1.25)$$

Also gibt es $\forall \delta > 0$ ein β_0 , so dass $\forall \beta > \beta_0$ gilt:

$$\cosh(a_u - a_v) - 1 = \frac{1}{2}(a_u - a_v)^2 + O((a_u - a_v)^4) \leq \frac{1 + \delta}{2}(a_u - a_v)^2 \quad (1.26)$$

$$\Rightarrow \beta \sum_{\langle u, v \rangle} \cosh(a_u - a_v) - 1 \leq \beta \sum_{\langle u, v \rangle} \frac{1 + \delta}{2} (a_u - a_v)^2 \quad (1.27)$$

Unter Ausnutzen der periodischen Randbedingungen erhält man durch Umordnen:

$$\beta \frac{1 + \delta}{2} \sum_{\langle u, v \rangle} (a_u - a_v)^2 = \beta \frac{1 + \delta}{2} \sum_{y \in \Lambda_L} a_y (-\Delta a_y) = \frac{1 + \delta}{2} (a_0 - a_x) \quad (1.28)$$

Denn nach Definition der a_y gilt:

$$\Delta a_y = \frac{1}{\beta} (\delta_{y,0} - \delta_{y,x}) \quad (1.29)$$

Zusammengefasst bekommt man also:

$$\begin{aligned} |\langle s_x \cdot s_0 \rangle_{\beta, L}| &\leq \exp((a_x - a_0)(1 - \frac{1 + \delta}{2})) \\ &= \exp(\frac{1 - \delta}{2} (a_x - a_0)) \\ &= \exp(\frac{1 - \delta}{\beta} C_L(x)) \end{aligned} \quad (1.30)$$

Dabei wurde $C_L(x) = C_L(-x)$ und $C_L(0) = 0$ benutzt.

Diese Schranke hält auch im Grenzwert für $L \rightarrow \infty$. Einsetzen von (1.30) führt dann zur Aussage des Theorems für das $O(2)$ -Modell

Für ein allgemeines N benutzt man das aus Symmetriegründen gilt:

$$\langle s_0^{(1)} s_x^{(1)} + s_0^{(2)} s_x^{(2)} \rangle_N = \frac{2}{N} \langle s_x \cdot s_0 \rangle_N \quad (1.31)$$

Nun wählt man eine Parametrisierung, so dass gilt: $s_x^{(1)} = \Omega_N \cos \varphi_x$ und $s_x^{(2)} = \Omega_N \sin \varphi_x$ und φ_x von keiner weiteren Komponente von s_x abhängt. $|\Omega_N| \leq 1$ hält für jede mögliche räumliche Orientierung. (Sonst würde $(s_x^{(1)})^2 + (s_x^{(2)})^2 = \Omega_N^2 > 1$ gelten, was aber nach Voraussetzung ausgeschlossen ist.) Insgesamt bekommt man daher:

$$\begin{aligned} |\langle s_0^{(1)} s_x^{(1)} + s_0^{(2)} s_x^{(2)} \rangle_N| &= |\langle \Omega_N \cos(\varphi_x - \varphi_0) \rangle_N| \\ &\leq |\langle \cos(\varphi_x - \varphi_0) \rangle_N| \\ &= |\langle \cos(\varphi_x - \varphi_0) \rangle_2| \\ &= |\langle s_x \cdot s_0 \rangle_2| \end{aligned} \quad (1.32)$$

Womit das Theorem vollständig gezeigt wurde.

Anmerkung: Der hier gegebene Beweis orientiert sich stark am Originalpaper sowie an einem Beweis dieses Theorems von Manfred Salmhofer.

1.4 Asymmetrische Kopplung in drei Dimensionen

Die genannten Theoreme treffen für zweidimensionale Systeme sehr starke Aussagen. Für drei Dimensionen kann eine spontane Magnetisierung jedoch in keiner Weise ausgeschlossen werden. Daher stellt sich die Frage was passiert, wenn man ein dreidimensionales Gitter betrachtet, aber dessen Kopplung in die x_3 -Richtung sehr schwach macht. Die zugehörige Kopplungskonstante sieht dann wie folgt aus:

$$J_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{falls } |x_i - x_j| = 1 \wedge x_i - x_j \neq \pm e_3 \\ \varepsilon & \text{falls } x_i - x_j = \pm e_3 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.33)$$

In den folgenden beiden Kapiteln werden daher Schranken für die Magnetisierung im Heisenberg-Modell sowie die globale Spin-Spin-Korrelation im klassischen $O(N)$ -Modell in asymmetrisch-dreidimensionalen Systemen aus bekannten Aussagen für zwei- beziehungsweise dreidimensionale Systeme abgeleitet.

Kapitel 2

Magnetisierung im Heisenberg-Modell

Im Folgenden wird eine von G. Roepstorff gefundene Schranke der Magnetisierung in drei Dimensionen dazu genutzt durch Einsetzen des asymmetrischen Falls eine obere Schranke in Abhängigkeit von der Stärke der Asymmetrie herzuleiten.

Theorem:

Sei $\langle \cdot \rangle_{\varepsilon, \beta}$ der Erwartungswert des Heisenberg-Modells auf $\mathbb{Z}^3$ mit asymmetrischer nächster-Nachbar-Kopplung. Dann gibt es $\forall \delta > 0$ ein ε_0 , so dass $\forall \varepsilon < \varepsilon_0$ die reduzierte Magnetisierung $m_{\varepsilon, \beta} = |\langle s_0 \rangle_{\varepsilon, \beta}|$ nach oben beschränkt ist durch:

$$m_{\varepsilon, \beta} \leq 2(1 + \delta) \sqrt{\frac{\pi \beta}{\ln \frac{1}{\varepsilon}}} \quad (2.1)$$

Beweis: Gert Roepstorff zeigte 1977 das folgende Theorem:

Im n -dimensionalen Heisenberg-Modell mit nächster-Nachbar-Kopplung ist die reduzierte Magnetisierung m_β nach oben beschränkt durch M_β wobei M_β implizit gegeben ist durch:

$$1 - M_\beta = \frac{M_\beta}{(2\pi)^n} \int_{[-\pi, \pi]^3} d^n k \frac{1}{\exp(2 \frac{\beta}{M_\beta} E(k)) - 1} \quad (2.2)$$

mit der Energie

$$E(k) = \sum_{\nu=1}^n 1 - \cos(k_\nu) \quad (2.3)$$

Für den Beweis wird der $n = 3$ Fall betrachtet und die Energie in x_3 -Richtung ist entsprechend der Asymmetrie des Systems modifiziert:

$$1 - M_{\varepsilon, \beta} = \frac{M_{\varepsilon, \beta}}{(2\pi)^3} \int_{[-\pi, \pi]^3} d^3 k \frac{1}{\exp(2 \frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} E_\varepsilon(k)) - 1} \quad (2.4)$$

$$E_\varepsilon(k) = (1 - \cos(k_1)) + (1 - \cos(k_2)) + \varepsilon(1 - \cos(k_3)) \quad (2.5)$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
1 - M_{\varepsilon, \beta} &\geq \frac{M_{\varepsilon, \beta}}{(2\pi)^3} \int_{[-\pi, \pi]^3} d^3k \frac{1}{\exp(2\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}}(k_1^2 + k_2^2 + \varepsilon k_3^2)) - 1} \\
&\geq \frac{M_{\varepsilon, \beta}}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} dk_3 \int_0^{\pi} dr \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{\exp(2\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}}(r^2 + \varepsilon k_3^2)) - 1} \\
&= \frac{M_{\varepsilon, \beta}^2}{(2\pi)^2 \beta} \int_{-\pi}^{\pi} dk_3 \left[\frac{1}{2} \left(\ln(\exp(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}}(r^2 + \varepsilon k_3^2)) - 1) - r^2 \right) \right]_{r=0}^{r=\pi} \\
&= \frac{M_{\varepsilon, \beta}^2}{2(2\pi)^2 \beta} \int_{-\pi}^{\pi} dk_3 \ln(\exp(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}}(\pi^2 + \varepsilon k_3^2)) - 1) - \pi^2 - \ln(\exp(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} \varepsilon k_3^2) - 1) \\
&\geq \frac{M_{\varepsilon, \beta}^2}{(2\pi)^2 \beta} \int_0^{\pi} dk_3 \ln(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}}(\pi^2 + \varepsilon k_3^2)) - \pi^2 - \ln(\frac{k_3^2}{\pi^2}(\exp \frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} \varepsilon \pi^2) - 1) \\
&= \frac{M_{\varepsilon, \beta}^2}{(2\pi)^2 \beta} \left(\pi \ln(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} \pi^2 (1 + \varepsilon)) - 2 \right) + 2 \frac{\pi}{\sqrt{\varepsilon}} \arctan(\sqrt{\varepsilon}) - \pi \left(\ln(\exp(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} \varepsilon) - 1) - 2 \right) - \pi^3 \\
&\geq \frac{1}{4\pi} \frac{M_{\varepsilon, \beta}^2}{\beta} \left(\ln(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} \frac{\pi^2}{\exp(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} \varepsilon) - 1}) + 2 - \pi^2 \right)
\end{aligned} \tag{2.6}$$

[GGF. FÜR LETZTE INTEGRATION NOCH EINEN SCHRITT MEHR DURCHFÜHREN]
Wegen $\exp(x) = 1 + x + O(x^2)$ gibt es $\forall \delta > 0$ ein ε_0 , so dass $\forall \varepsilon < \varepsilon_0$ gilt:

$$\frac{1}{4\pi} \frac{M_{\varepsilon, \beta}^2}{\beta} \left(\ln(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} \frac{\pi^2}{\exp(\frac{\beta}{M_{\varepsilon, \beta}} \varepsilon) - 1}) + 2 - \pi^2 \right) \geq \frac{1 - \delta}{4\pi} \frac{M_{\varepsilon, \beta}^2}{\beta} \ln(\frac{1}{\varepsilon}) \tag{2.7}$$

Insgesamt folgt also:

$$1 - M_{\varepsilon, \beta} - \frac{1 - \delta}{4\pi} \frac{M_{\varepsilon, \beta}^2}{\beta} \ln(\frac{1}{\varepsilon}) \geq 0 \tag{2.8}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned}
M_{\varepsilon, \beta} &\leq \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{1 - \delta}{\pi \beta} \ln(\frac{1}{\varepsilon})}}{\frac{1 - \delta}{2\pi \beta} \ln(\frac{1}{\varepsilon})} \\
&\leq 2 \sqrt{\frac{\pi \beta}{(1 - \delta) \ln(\frac{1}{\varepsilon})}} \\
&\leq 2(1 + \delta) \sqrt{\frac{\pi \beta}{\ln(\frac{1}{\varepsilon})}}
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Aus $m_{\varepsilon, \beta} \leq M_{\varepsilon, \beta}$ folgt dann die Aussage.

Kapitel 3

Spin-Spin-Korrelation im klassischen $O(N)$ -Modell

In diesem Kapitel wird nach Vorbild des McBryan-Spencer-Arguments eine obere Schranke für eine globale Spin-Spin-Korrelation für stark asymmetrische Kopplung hergeleitet.

Theorem:

Sei $N \geq 2$ und $\langle \cdot \rangle_{\varepsilon, \beta}$ der Erwartungswert des klassischen $O(N)$ -Modells auf $\mathbb{Z}^3$ mit asymmetrischer nächster-Nachbar-Kopplung. Sei weiter $x = ae_1 + be_2$. Dann gibt es $\forall \delta > 0$ ein β_0 , so dass $\forall \beta > \beta_0$ gilt:

$$|\langle s_x \cdot s_0 \rangle_{\varepsilon, \beta}| \leq \frac{N}{2} \left(\frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{|x|} + \sqrt{\frac{1}{|x|^2} + 2\varepsilon} \right) \right)^{(1-\delta) \frac{1-J_0(1)}{4\pi} \frac{1}{\beta}} \quad (3.1)$$

Weiter findet man $\forall \delta > 0$ ein x_0 und ein β_0 , so dass $\forall x$ mit $|x| > x_0$ sowie $\beta > \beta_0$ gilt:

$$|\langle s_x \cdot s_0 \rangle_{\varepsilon, \beta}| \leq \left(\frac{1+\delta}{2\pi} \sqrt{2\varepsilon} \right)^{\frac{1-\delta}{4\pi} \frac{1}{\beta}} \quad (3.2)$$

Beweis:

Die Asymmetrie des Systems wird über einen gewichteten Laplace-Operator Δ_ε berücksichtigt:

$$(-\Delta_\varepsilon \phi)(x) := \sum_{|x-y|=1} \gamma_\varepsilon(x-y)(\phi(x) - \phi(y)) \quad (3.3)$$

mit

$$\gamma_\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon & \text{falls } x = \pm e_3 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}$$

Wiederum wird dessen Fundamentallösung zunächst für ein Gitter Λ_L endlicher Seitenlänge L gesucht:

$$(-\Delta_\varepsilon C_{L,\varepsilon})(x) = \delta_{0,x} \quad (3.4)$$

Durch Fouriertransformation erhalten wir:

$$2\hat{D}_\varepsilon(k)\hat{C}_{L,\varepsilon}(k) = 1 \quad (3.5)$$

mit

$$\hat{D}_\varepsilon(k) = (1 - \cos(k_1)) + (1 - \cos(k_2)) + \varepsilon(1 - \cos(k_3)) \quad (3.6)$$

Rücktransformation ergibt:

$$\tilde{C}_{L,\varepsilon}(x) = \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{k \in \Lambda_L^* \setminus \{0\}} \frac{\exp(ik \cdot x)}{2\hat{D}_\varepsilon(k)} \quad (3.7)$$

Und somit für $C_{L,\varepsilon}(x)$ mit $C_{L,\varepsilon}(0) = 0$

$$C_{L,\varepsilon}(x) = \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{k \in \Lambda_L^* \setminus \{0\}} \frac{\exp(ik \cdot x) - 1}{2\hat{D}_\varepsilon(k)} \quad (3.8)$$

Dieser Grenzwert für $L \rightarrow \infty$ existiert und man erhält:

$$C_\varepsilon(x) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{[-\pi,\pi]^3} d^3k \frac{1 - \exp(ik \cdot x)}{2\hat{D}_\varepsilon(k)} \quad (3.9)$$

und somit für ein x aus der x_1 - x_2 -Ebene :

$$\begin{aligned} C_\varepsilon(x) &\leq -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{[-\pi,\pi]^3} d^3k \frac{1 - \exp(ik \cdot x)}{k_1^2 + k_2^2 + 2\varepsilon(1 - \cos(k_3))} \\ &\leq -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\pi dr \int_{-\pi}^\pi dk_3 \int_{-\pi}^\pi d\theta \, r \frac{1 - \exp(i|x|r \cos(\theta))}{r^2 + 2\varepsilon(1 - \cos(k_3))} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dr \int_{-\pi}^\pi dk_3 \, r \frac{1 - J_0(|x|r)}{r^2 + 2\varepsilon(1 - \cos(k_3))} \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dr \left[r \frac{1 - J_0(|x|r)}{\sqrt{r^4 + 2r^2\varepsilon}} \arctan(c(TBD!) \tan(\frac{k_3}{2})) \right]_{k_3=-\pi}^{k_3=\pi} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi dr \frac{1 - J_0(|x|r)}{\sqrt{r^2 + 2\varepsilon}} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi|x|} dr \frac{1}{|x|} \frac{1 - J_0(r)}{\sqrt{\frac{r^2}{|x|^2} + 2\varepsilon}} \\ &\leq -\frac{1}{4\pi} \int_\rho^{\pi|x|} dr \frac{j_{\min}(\rho)}{\sqrt{r^2 + 2|x|^2\varepsilon}} \\ &= -\frac{j_{\min}(\rho)}{4\pi} \left[\ln(r + \sqrt{r^2 + 2|x|^2\varepsilon}) \right]_{r=\rho}^{r=\pi|x|} \\ &= -\frac{j_{\min}(\rho)}{4\pi} \ln \left(\frac{\pi|x| + \sqrt{(\pi|x|)^2 + 2|x|^2\varepsilon}}{\rho + \sqrt{\rho^2 + 2|x|^2\varepsilon}} \right) \\ &\leq \frac{j_{\min}(\rho)}{4\pi} \ln \left(\frac{1}{2\pi} \left(\frac{\rho}{|x|} + \sqrt{\frac{\rho^2}{|x|^2} + 2\varepsilon} \right) \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

mit:

$$j_{\min}(\rho) := \min_{y \geq \rho} (1 - J_0(y))$$

$\forall 0 \leq \rho \leq \pi|x|$

Man führt nun die selben Abschätzungen durch wie im Beweis zum McBryan-Spencer-Argument und erhält analog:

$$|\langle s_x \cdot s_0 \rangle_{\varepsilon,\beta}| \leq \exp\left(\frac{1-\delta}{\beta} C_\varepsilon(x)\right) \quad (3.11)$$

Für $\rho = 1$ erhält man die erste Aussage, für $\rho = \sqrt{|x|}$ die Zweite. dabei ist zu beachten, dass $j_{min}(1) = 1 - J_0(1)$ und $\lim_{\rho \rightarrow \infty} j_{min}(\rho) = 1$ gilt.

Für die Verallgemeinerung auf das $O(N)$ -Modell argumentiert man erneut analog zum Beweis des McBryan-Spencer-Arguments.

Kapitel 4

Fazit

Es konnten tatsächlich obere Schranken hergeleitet werden, welche mit kleinem epsilon sehr langsam gegen 0 ziehen, spannend daher:

- Tatsächliches ausrechnen von werten
- realistischer: untere Schranken!

Literaturverzeichnis

- [1] Werner Heisenberg Zur Theorie des Ferromagnetismus
- [2] N. David Mermin und Herbert Wagner. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in one- or two-dimensional Heisenberg Models
- [3]

Erklärung

TBD-Liste:

- Literaturverzeichnis vervollständigen
- konstante c in kapitel 3 ausrechnen
- Abstract übersetzen
- Fazit vervollständigen/schreiben