Statistische Mechanik ungeordneter Systeme, SoSe 2005

Timo Aspelmeier, Alexander K. Hartmann, Universität Göttingen

14. Juli 2005

13 Spinsysteme in Zufallsfeldern

Hamiltonfunktion:

$$\mathcal{H} = -\sum_{i<j} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i. \tag{1}$$

Hier soll J_{ij} nicht zufällig sein, es könnte z.B. $J_{ij} = J$ für nächste Nachbarn sein und 0 sonst oder $J_{ij} = J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ eine andere deterministische Funktion des Abstandes sein. Betrachte hier nur ferromagnetische WW. Die Spins s_i können Isingspins sein oder m-komponentige Vektoren.

Zufallselement steckt hier in den lokalen Feldern h_i. Einfachster Fall: unabhängige Zufallsvariablen mit identischer Wahrscheinlichkeitsverteilung. Benutzen hier nur

$$\overline{h_i} = 0 \tag{2}$$

$$\overline{h_i h_j} = h^2 \delta_{ij} \tag{3}$$

mit symmetrischer Verteilung $P(h) = P(-h)$.

13.1 Untere kritische Dimension/Imry-Ma Argument

13.1.1 Ohne Zufallsfeld

Betrachte zunächst $H = 0$, also kein Feld, und Isingspins. Vergleiche geordneten Zustand (alle Spins zeigen in die gleiche Richtung) mit einem Zustand, der aus Clustern der mittleren Größe L besteht. Energiedifferenz zwischen diesen beiden Zuständen ist $\Delta E \sim L^{d-1}$ pro Cluster (d: Raumdimension), denn die Oberfläche eines Clusters ist $\sim L^{d-1}$. Natürlich gibt es einen Entropiegewinn durch die Existenz vieler Cluster. Falls $d > 1$, steigen die Energiekosten an mit L, so dass bei kleiner Temperatur nur wenige kleine Cluster im Hintergrund der geordneten Phase entstehen. Falls aber $d < 1$, so sinken die Energiekosten mit L, so dass die freie Energie maximiert wird, wenn sich eine ungeordnete Phase aus großen Domänen ausbildet – die $T = 0$ geordnete Phase ist instabil gegenüber

infinitesimalen Erhöhungen der Temperatur. Somit ist für Ising-Systeme die untere kritische Dimension $d_u = 1$.

Betrachte nun $m > 1$, d.h. Vektorspins mit kontinuierlicher Symmetrie. Clustergrenzen sind nun nicht mehr scharf. Die Spins haben die Möglichkeit, graduell zu rotieren von einer Domäne zur nächsten. Energie einer Domänenwand zwischen zwei Domänen mit relativem Spinwinkel α ist $\Delta E = JL^{d-1}D(1-s_i s_j)$. Hier ist $L^{d-1}D$ das Volumen der Domänenwand und $s_i s_j$ ist das Skalarprodukt zweier benachbarter Spins in der Domänenwand, welches überall gleich und gleich $\cos\alpha/D$ sein sollte. Der Term $J(1-\cos\alpha/D)$ ist also der Energieunterschied zwischen benachbarten Spins in einem geordnetem Block und in der Domänenwand. Die Domänenwandenergie $\Delta E = JL^{d-1}D(1-\cos\alpha/D)$ wird minimiert, wenn D möglichst groß ist, also $D \approx L$ (denn die Domänenwand kann schwerlich größer werden als der zugehörige Cluster). Dann ist $\Delta E = JL^{d-1}L(1-(1-\frac{1}{2}\alpha^2/L^2+\cdots)) \sim L^{d-2}$. Nun gilt das gleiche Argument für die untere kritische Dimension wie für Isingspins, nur dass $\Delta E \sim L^{d-2}$, also ist $d_u = 2$.

13.1.2 Mit Zufallsfeld

Betrachte jetzt $H > 0$. In einem Cluster der Größe L herrscht ein Gesamtfeld $H_{cl} = \sum_{i\in\text{Cluster}} H_i$. Zwar ist $\overline{H_i}$=0, aber nach zentralem Grenzwertsatz ist die Summe aus n unabhängigen Zufallsvariablen mit Mittelwert 0 ihrerseits eine Zufallsgröße mit Varianz $\sim n$. D.h. $H_{cl} \sim \pm L^{d/2}$, denn der Cluster besteht aus $\sim L^d$ Spins. Wenn sich die Spins domänenweise entlang dieses Feldes ausrichten, verlieren sie $\sim L^{d-a}$ an Domänenwandenergie ($a = 1$: Ising, $a = 2$: Vektorspins), aber sie gewinnen $\sim L^{d/2}$ an Feldenergie. Es ist also energetisch vorteilhaft in Domänen aufzubrechen, wenn $L^{d/2} - \text{const} \times L^{d-a} > 0$. Falls $d/2 > d - a \Leftrightarrow d < 2a$, gibt es immer eine Länge L, für die das der Fall ist. Somit ist die untere kritische Dimension mit Zufallsfeld $d_u = 2$ für Isingspins und $d_u = 4$ für Vektorspins.

Man beachte, dass diese Überlegung völlig unabhängig von der Stärke des Zufallsfeldes ist. Jedes infinitesimale Zufallsfeld zerstört den Phasenübergang zwischen $d = 1$ und 2 (Ising) bzw. $d = 2$ und 4 (Vektorspins).

13.2 Replikarechnung für das Mean-field RFIM

RFIM: Random field Ising model

Vorherige Überlegung war für kleine Dimensionen, jetzt betrachten wir das System für große Dimensionen, d.h. $d = \infty$. Wie üblich erwartet man, dass die kritischen Exponenten des Mean-field-Modells auch für endliche Dimensionen bis herunter zur oberen kritischen Dimension d_o gelten.

Betrachte voll vernetztes Spinsystem, $J_{ij} = J/N$ für $i \neq j$ und 0 sonst. Der Faktor $1/N$ sorgt dafür, dass am Ende die freie Energie etc. extensive Größen sind.

Replikatrick: brauchen $\overline{Z^n}$. Berechne zunächst

$$Z^n = \mathrm{Tr}\exp\left\{\frac{\beta J}{2N}\sum_{ij} s_i^\alpha s_j^\alpha - \frac{\beta J}{N}Nn + \beta\sum_{i\alpha} h_i s_i^\alpha\right\} \tag{4}$$

$$= \mathrm{Tr}\int\left(\prod_\alpha \frac{\sqrt{\beta JN}dQ^\alpha}{\sqrt{2\pi}}\right)\exp\left\{-\frac{\beta JN}{2}\sum_\alpha (Q^\alpha)^2 - \beta Jn + \beta J\sum_\alpha Q^\alpha \sum_i s_i^\alpha + \beta\sum_{i\alpha} h_i s_i^\alpha\right\} \tag{5}$$

$$= \int\left(\prod_\alpha \frac{\sqrt{\beta JN}dQ^\alpha}{\sqrt{2\pi}}\right)\exp\left\{-\frac{\beta JN}{2}\sum_\alpha (Q^\alpha)^2 - \beta Jn + \sum_{i\alpha}\ln 2\cosh(\beta JQ^\alpha + \beta h_i)\right\} \tag{6}$$

$$= \int\left(\prod_\alpha \frac{\sqrt{\beta JN}dQ^\alpha}{\sqrt{2\pi}}\right)\exp\left\{-\beta Jn + N\left[-\frac{\beta J}{2}\sum_\alpha (Q^\alpha)^2 + \frac{1}{N}\sum_{i\alpha}\ln 2\cosh(\beta JQ^\alpha + \beta h_i)\right]\right\} \tag{7}$$

$$= e^{-\beta Jn}\left(\int \frac{\sqrt{\beta JN}dQ}{\sqrt{2\pi}}\exp\left\{N\left[-\frac{\beta J}{2}Q^2 + \frac{1}{N}\sum_i \ln 2\cosh(\beta JQ + \beta h_i)\right]\right\}\right)^n. \tag{8}$$

13.2.1 Sattelpunktsrechnung

Benutze jetzt Sattelpunktsmethode ($N \to \infty$). Sattelpunktsgleichung:

$$0 = -\beta JQ + \frac{1}{N}\sum_i \tanh(\beta JQ + \beta h_i)\beta J \tag{9}$$

$$\Leftrightarrow \quad Q = \frac{1}{N}\sum_i \tanh(\beta JQ + \beta h_i) = \overline{\tanh(\beta(JQ + h))} + \mathcal{O}(1/\sqrt{N}) \tag{10}$$

Die Sattelpunktswerte von Q hängen nicht von der Realisierung der Unordnung ab (bis auf Terme der Ordnung $1/\sqrt{N}$): Selbstmittelung. Somit ist (subextensive Terme vernachlässigt)

$$Z^n = \exp\left\{n\left(-\frac{\beta JN}{2}Q^2 + \sum_i \ln 2\cosh(\beta JQ + \beta h_i)\right)\right\}, \text{ also} \tag{11}$$

$$\overline{Z^n} = \exp\left\{nN\left(-\frac{\beta J}{2}Q^2 + \ln 2\right)\right\}\overline{\cosh^n(\beta JQ + \beta h)}^N \tag{12}$$

$$\longrightarrow \exp\left\{nN\left(-\frac{\beta J}{2}Q^2 + \ln 2 + \overline{\ln\cosh(\beta JQ + \beta h)}\right)\right\} \quad (n \to 0) \tag{13}$$

wobei hier für Q die Lösung aus der Sattelpunktsgleichung (10) einzusetzen ist. Die freie Energie ist also

$$\beta F = -\lim_{n\to 0}\frac{1}{n}\ln\overline{Z^n} \tag{14}$$

$$= -N\left(-\frac{\beta J}{2}Q^2 + \overline{\ln 2\cosh(\beta JQ + \beta h)}\right) \tag{15}$$

13.2.2 Bedeutung von Q

Die Sattelpunktsgleichung (10) ist letztlich entstanden aus Gl. (5),

$$0 = \frac{\partial}{\partial Q^\gamma}\left(-\frac{\beta J}{2}\sum_\alpha (Q^\alpha)^2 + \frac{1}{N}\ln \mathrm{Tr}\exp\left\{\beta J\sum_\alpha Q^\alpha \sum_i s_i^\alpha + \beta\sum_{i\alpha} h_i s_i^\alpha\right\}\right) \tag{16}$$

$$= -\beta J Q^\gamma + \frac{1}{N}\frac{\mathrm{Tr}\beta J\sum_i s_i^\gamma \exp\left\{\beta J\sum_\alpha Q^\alpha\sum_i s_i^\alpha + \beta\sum_{i\alpha} h_i s_i^\alpha\right\}}{\mathrm{Tr}\exp\left\{\beta J\sum_\alpha Q^\alpha\sum_i s_i^\alpha + \beta\sum_{i\alpha} h_i s_i^\alpha\right\}} \tag{17}$$

$$\Rightarrow \quad Q^\gamma = \left\langle \frac{1}{N}\sum_i s_i^\gamma \right\rangle. \tag{18}$$

Das bedeutet, dass Q^γ am Sattelpunkt gleich der Magnetisierung der Replika γ ist. Diese ist aber gleich für alle Replikas (Replikasymmetrie).

13.2.3 Phasenübergang

Die Sattelpunktsgleichung (10) hat immer die Lösung $Q = 0$, sofern die Zufallsfelder h_i eine symmetrische Verteilungsfunktion haben, denn dann ist $\overline{\tanh\beta h} = 0$. Annahme: es gibt einen kontinuierlichen Phasenübergang, d.h. Q ist klein in der Nähe desselben. Entwickle dann den tanh in eine Taylorreihe:

$$\tanh(\beta(JQ+h)) = \tanh\beta h + \beta JQ\tanh'\beta h + \frac{1}{2}(\beta JQ)^2\tanh''\beta h + \frac{1}{6}(\beta JQ)^3\tanh'''\beta h + \cdots \tag{19}$$

Nun ist

$$\tanh' x = 1 - \tanh^2 x \tag{20}$$

$$\tanh'' x = -2\tanh x(1-\tanh^2 x) \tag{21}$$

$$\tanh''' x = -2(1-\tanh^2 x) + 6\tanh^2 x(1-\tanh^2 x). \tag{22}$$

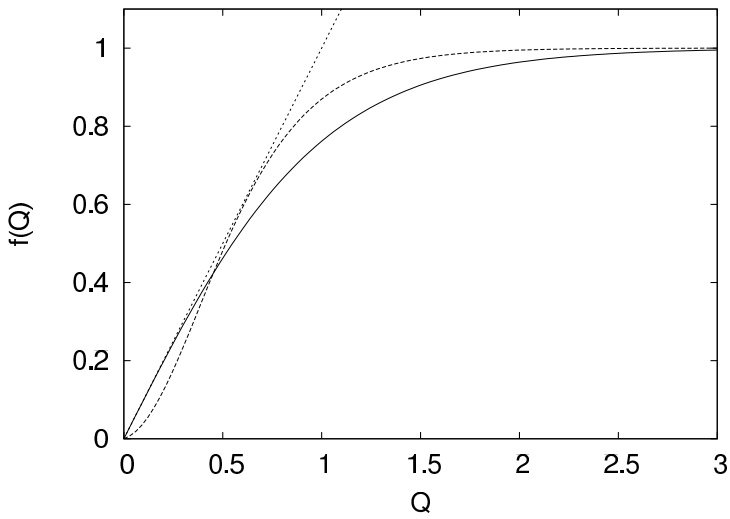

Abbildung 1: Die Fälle $B > 0$ (durchgezogene Linie) und $B < 0$ (gestrichelte Linie)

Dies alles eingesetzt in die Sattelpunktsgleichung ergibt (beachte, dass alle ungeraden Mittelwerte wie $\overline{\tanh \beta h}$ verschwinden)

$$Q = \beta J Q(\overline{1 - \tanh^2 \beta h}) + \frac{1}{6}(\beta J Q)^3(\overline{-2(1 - \tanh^2 \beta h) + 6 \tanh^2 \beta h(1 - \tanh^2 \beta h)}) \tag{23}$$

$$= \left(\beta J(1 - \overline{\tanh^2 \beta h})\right) Q - \frac{1}{6}(\beta J)^3 \left(2 - 8\overline{\tanh^2 \beta h} + 6\overline{\tanh^4 \beta h}\right) Q^3 \tag{24}$$

$$= AQ - BQ^3. \tag{25}$$

Der Phasenübergang tritt ein, wenn $A = 1$ wird (übliches Argument, Steigung auf der linken Seite gleich Steigung auf der rechten Seite, siehe Mean-field Ferromagnet oder RS-Spinglas), *vorausgesetzt*, $B > 0$ an der Stelle. Wenn $B < 0$, so wird der Term von der Ordnung Q^5 relevant und es gibt einen Phasenübergang 1. Ordnung (siehe Abb. 1).

Da $\overline{\tanh^2 \beta h} < 1$, ist $0 < 1 - \overline{\tanh^2 \beta h} < 1$, also ist die inverse Übergangstemperatur $\beta J > 1$, d.h. die Übergangstemperatur ist abgesenkt gegenüber dem Fall ohne Zufallsfeld. Intuitiv naheliegend: die zusätzliche Unordnung durch das Zufallsfeld erfordert eine Absenkung der Temperatur, um Ordnung herzustellen.

13.2.4 Art des Phasenübergangs

Betrachte spezielle Verteilung des Zufallsfeldes, nämlich

$$P(h) = \frac{1}{2}\delta(h - h_0) + \frac{1}{2}\delta(h + h_0). \tag{26}$$

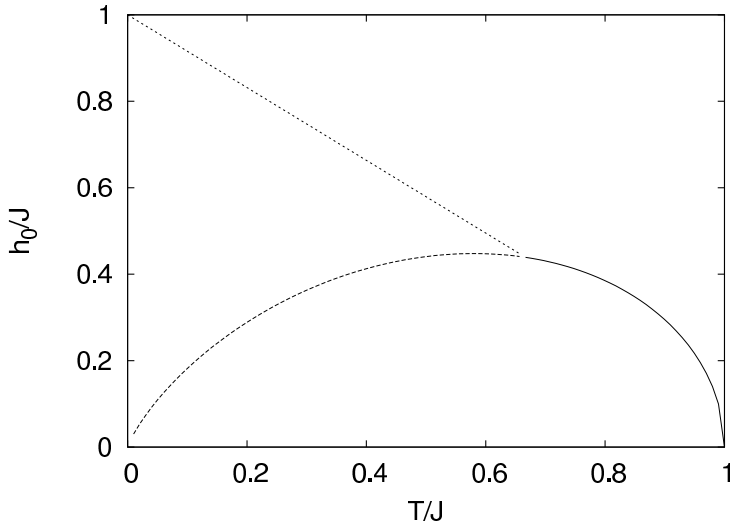

Abbildung 2: Phasendiagramm des Mean-field RFIM. Die durchgezogene Linie ist ein kontinuierlicher Phasenübergang, die gepunktete (Skizze) ein Phasenübergang 1. Ordnung. Die gestrichelte Linie wäre die Phasengrenze, wenn der Übergang kontinuierlich bliebe.

Für diese Verteilung kann man A und B leicht ausrechnen. Es gilt

$$A = \beta J(1 - \tanh^2 \beta h_0) \tag{27}$$

$$B = \frac{1}{3}(\beta J)^3 A(1 - 3\tanh^2 \beta h_0). \tag{28}$$

Löse zunächst die Gleichung $A = 1$ nach h_0/J auf,

$$1/(\beta J) = 1 - \tanh^2 \beta J \frac{h_0}{J}, \tag{29}$$

$$\Leftrightarrow \qquad \frac{h_0}{J} = \frac{1}{\beta J} \tanh^{-1} \sqrt{1 - \frac{1}{\beta J}} \tag{30}$$

Das ergibt das Phasendiagramm, siehe Abb. 2. Allerdings gilt Gl. (30) nur, solange der Phasenübergang tatsächlich kontinuierlich ist, d.h. solange $B > 0$. Aber $B < 0$, sofern $3\tanh^2 \beta h_0 > 1$, d.h. für $T/J < 2/3$.

Für $\beta \to \infty$ gilt $Q = \underline{1, \text{ solange } h_0} < J$, denn dann ist $\overline{\tanh \beta(J + h)} = 1$. Sobald jedoch $h_0 > J$, ist $\overline{\tanh \beta(J + h)} = 0$, also ist $Q = 0$ einzige Lösung. Die Phasengrenze schneidet also die h_0/J-Achse im Punkt 1.

13.3 Bemerkungen

- Die Mean-field-Rechnung liefert die üblichen Mean-field-Exponenten (dort, wo der Übergang kontinuierlich ist). Z.B. ist der Exponent des Ordnungsparameters Q gegeben durch $\beta = \frac{1}{2}$. Das folgt aus $Q^2 = (A-1)/B$ und der

Tatsache, dass A und B glatte Funktionen der Temperatur sind. Der Phasenübergang ist also in der gleichen Universalitätsklasse wie der normale ferromagnetische.

- Erst unterhalb von $d_o = 6$ werden die Zufallsfelder relevant und verändern die Exponenten des Phasenübergangs (die obere kritische Dimension für den Ferromagneten ohne Zufallsfeld war 4).
- Replikarechnung ist replikasymmetrisch. Ordnungsparameter Q ist vektorielle Größe, im Gegensatz zum Spinglas, wo es eine Matrix (bzw. Funktion bei RSB) ist.
- Für gaußverteilte Zufallsfelder ist der Übergang immer kontinuierlich (weil immer $B > 0$, wenn $A = 1$).
- In endlichen Dimensionen ist es nicht klar, ob der Übergang kontinuierlich ist oder nicht, obwohl viele numerische Anzeichen auf einen kontinuierlichen hindeuten.
- Für m-komponentige Spins in endlichen Dimensionen tritt RSB ein.
- Obwohl eigentlich einfacher als das Spinglas, ist für das RFIM vergleichsweise wenig analytisch bekannt.