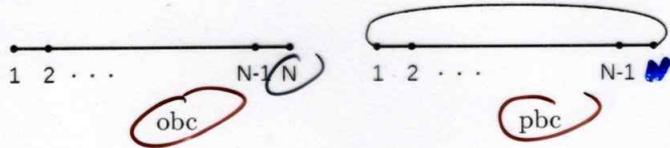


7 Transfermatrix

Dieses Kapitel führt die Transfermatrix am Beispiel des 1d-Isingmodells ein:

$$H = -J \sum_{i=2}^N s_{i-1} s_i$$



Vorbemerkung: 7.1 Direkte Lösung bei $h=0$ und obc

Zustandssumme: Lässt sich mithilfe einer Rekursionsformel finden:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{s_i, i < N\}} e^{\beta J \sum_{i=2}^{N-1} s_{i-1} s_i} \sum_{s_N} e^{\beta J s_{N-1} s_N}$$

N Plätze \nearrow Z_{N-1} ~~unabh. von s_{N-1} !~~

$$Z_N = 2 \cosh(\beta J) Z_{N-1} \stackrel{\text{Rekursion}}{=} (2 \cosh(\beta J))^{N-1} Z_1$$

$$\boxed{Z_N = 2^N \cosh(\beta J)^{N-1}} \quad (7.1) \quad \approx (6.13)$$

Korrelationen: Für $h = 0$ kann man sich eines Tricks bedienen¹ und variable Kopplungen J_i einführen:

$$H = \sum_{i=2}^N J_i s_{i-1} s_i \implies Z_N = 2 \prod_{i=2}^N (2 \cosh(\beta J_i))$$

$$\begin{aligned} \langle s_m s_n \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} s_m s_n e^{-\beta H} = \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} \overbrace{(s_m s_{m+1})}^{=1} \cdots \overbrace{(s_{n-1} s_n)}^{=1} e^{-\beta H} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} \frac{\partial}{\partial \beta J_{m+1}} \frac{\partial}{\partial \beta J_{m+2}} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta J_n} e^{-\beta H} \rightarrow \text{Ableitungen vertauschen mit Summe!} \\ &= \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta J_{m+1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta J_n} Z = \prod_{k=m+1}^n \tanh(\beta J_k) \end{aligned} \quad (7.2)$$

Zum Schluss stellt man die Isotropie des Systems wieder her, indem man alle $J_i = J$ setzt. Damit ergibt sich für zwei Spins im Abstand r :

$$\langle s_m s_{m+r} \rangle = (\tanh(\beta J))^r = (e^{-1/\xi})^r \approx e^{-r/\xi} \quad (7.3)$$

$$\xi = \frac{1}{\ln(\tanh(\beta J))} \quad (7.4)$$

¹Im Allgemeinen so nicht möglich

Bei großem β verhält sich die Korrelationslänge wie:

$$\xi \approx \frac{1}{2} e^{2\beta J}$$

divergiert also exponentiell in β für $\beta \rightarrow \infty$ und nicht, wie in höheren Dimensionen, potenzartig. Das 1d-Isingmodell hat somit eine Art "Phasenübergang" bei $T = 0$, jedoch mit exponentiellen Abhängigkeiten von β ~~Abhängigkeiten~~.

7.2 Zustandssumme via Transfermatrix

(Hier: pbc)

Unter Beachtung der Periodizität ($s_{N+1} = s_1$) kann man die Zustandssumme schreiben als:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} e^{\beta J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + \beta h \sum s_i} \quad (7.5)$$

Was man in nächste Nachbar-Paare $\langle ij \rangle$ umschreiben kann:

$$Z_N = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1}^N V(s_i, s_{i+1}) = \sum_{\{s_i\}} V(s_1, s_2) V(s_2, s_3) \cdots V(s_N, \overset{\equiv s_1}{s_{N+1}}) \quad (7.6)$$

mit $V(s, s') = e^{\beta J s s' + \frac{1}{2} h (s+s')}$ \rightarrow "Transfermatrix" (7.7)

$$V = \begin{bmatrix} V(+, +) & V(+, -) \\ V(-, +) & V(-, -) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{\beta J + \beta h} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta h} \end{bmatrix} \rightarrow \text{symmetrisch}$$

"Transfer"
im Ort:
von Platz i
zu Platz $i+1$

Die Summen über s_2, s_3, \dots lassen sich als Matrixmultiplikationen der einzelnen Transfermatrizen $V(s, s')$ auffassen und die Summe über Spin $s_1 \equiv s_{N+1}$ ist nichts anderes als die Spur über das Produkt aller Matrizen. Da die Matrix V unabhängig von den einzelnen Spins s, s' ist, erhält man für die Zustandssumme:

$$Z_N = \text{Tr}(V^N) \quad ! \quad (7.8)$$

N.B. Analogien zur Transfermatrix:

3. dm: $e^{-iHt} \approx \frac{1}{i\hbar} e^{-iH \frac{\hbar}{M}}$

1. Quantenmechanik: $Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \text{Tr} \left(\left(e^{-\frac{\beta \hat{H}}{M}} \right)^M \right)$

Transfermatrix in der imaginären Zeit

2. Markov Chain Monte Carlo (MCMC): Markov-Matrix P welche so konstruiert ist, dass $\pi P^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \pi$, mit π der gewünschten Verteilung, sowie $\pi P = \pi$ (Stationarität). Die Matrix P beschreibt hier „Transport“ in räumlicher Richtung

oh

M.C. - Zeit

oh

7.2.1 Berechnung von Z_N über Diagonalisierung von V

orthonormal

Da die Transfermatrix V symmetrisch ist, können die Eigenvektoren ~~diagonal~~ gewählt werden und man kann V zerlegen:

$$V = Q \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 \end{pmatrix} Q^{-1} \quad \text{mit } Q = (\vec{x}_0, \vec{x}_1) \quad (\text{Eigenvektoren } \vec{x}_0, \vec{x}_1 \text{ als Spalten})$$

$$\text{Tr}(V^N) = \text{Tr}(Q \Lambda Q^{-1} Q \Lambda Q^{-1} \cdots Q \Lambda Q^{-1}) \stackrel{\text{zyklisch vertauschen}}{=} \text{Tr}(\Lambda^N) = \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_0^N & 0 \\ 0 & \lambda_1^N \end{pmatrix}$$

$$Z_N = \lambda_0^N + \lambda_1^N \quad ! \quad (7.9)$$

mit mehr lokalen Zuständen

Allgemein (für andere Modelle) findet man:

$$Z_N = \sum_i \lambda_i^N \quad (7.10)$$

Für das betrachtete 1d-Ising-Modell erhält für die Eigenwerte λ :

$$\lambda_{0,1} = e^{\beta J} \cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \quad (7.11)$$

mit Magnetfeld ($h \neq 0$), bzw.

$$\lambda_{0,1} = e^{\beta J} \pm e^{-\beta J} \Rightarrow Z_N = 2^N (e^{\beta J} + e^{-\beta J}) \approx (6.12)$$

ohne Magnetfeld.

7.3 Thermodynamik mittels Transfermatrix

Wie im Kapitel 7.2.1 gezeigt lässt sich die Zustandssumme über die Eigenwerte λ der Transfermatrix schreiben:

$$Z_N = \sum_i \lambda_i^N \quad (7.13)$$

Sortiert man die Eigenwerte der Größe nach und zieht den größten Eigenwert λ_0 heraus, ergibt sich

$$Z_N = \lambda_0^N \left(1 + \sum_{i>0} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^N \right) \quad (7.14)$$

Im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$) verbleibt nur mehr der größte Eigenwert, alle Terme der Summe gehen gegen 0. Im folgenden werden einige Größen des 1D-Ising-Modells berechnet.

$Z_N \rightarrow \lambda^N$

7.3.1 Freie Energie

Für die freie Energie pro Platz f gilt damit:

$$f = -\frac{1}{N\beta} \log Z \xrightarrow{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta} \log \lambda_0 \quad (7.15)$$

Alle thermodynamischen Größen hängen von der freien Energie (oder deren Ableitungen) ab. Damit ist die gesamte Thermodynamik des Systems vollständig durch den größten Eigenwert λ_0 und dessen Abhängigkeit von T, h , etc. bestimmt.

7.3.2 Magnetisierung

N.B.: Bei niedriger Temperatur, d.h. großem βJ , steigt M sehr schnell mit h an, d.h. schon ein sehr kleines βh reicht für $M \approx 1$, nämlich wenn $x \ll 1$ equiv. $\sinh^2(\beta h) \gg \exp(-4 \beta J)$

entspricht großer Suszept. (s.u.)

Die Magnetisierung (pro Platz) ist gegeben durch $M = -\frac{\partial}{\partial h} f(h, T)$. Kurze Rechnung ergibt damit für das Ising-Modell in 1D:

$$M = \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} = \frac{1}{\sqrt{1+x}} \quad \text{mit } x = \frac{\exp(-4 \beta J)}{\sinh^2(\beta h)}$$

Für $h \rightarrow 0$ geht auch die Magnetisierung gegen 0. Das Ising-Modell in 1D zeigt daher (auch im thermodynamischen Limes) keine spontane Magnetisierung.

\leftrightarrow Mermin-Wagner-Theorem!

7.3.3 Suszeptibilität

Die Suszeptibilität ist gegeben durch $\chi = \frac{\partial M}{\partial h}$. Für $h = 0$ ergibt sich

$$\chi = e^{2\beta J} \quad (7.17)$$

Für $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) divergiert die Suszeptibilität daher exponentiell. *(Id. Jony)*

7.3.4 Innere Energie

Die innere Energie ist gegeben durch

$$u = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f) \quad (7.18)$$

Für $h = 0$ ergibt sich

$$u = -J \tanh \beta J \quad (7.19)$$

7.3.5 Spezifische Wärme

Für die spezifische Wärme bei $h = 0$ ergibt sich:

$$c = \frac{\partial u}{\partial T} = k_B (\beta J)^2 (1 - \tanh^2 \beta J) \quad (7.20)$$

Für $T \rightarrow 0$ ergibt eine Entwicklung:

$$c \approx (\beta J)^2 e^{-2\beta J} \quad (7.21)$$

Die Wärmekapazität geht also für $T \rightarrow 0$ exponentiell gegen 0.

7.4 Korrelationsfunktionen mittels Transfermatrix

Gesucht ist die verbundene Korrelationsfunktion:

$$G = \langle A_0 B_R \rangle - \langle A_0 \rangle \langle B_R \rangle \quad (7.22)$$

Die folgende Rechnung (räumliche Korrelationsfunktionen im klassischen Modell) weist starke Ähnlichkeiten zur Berechnung von Greensfunktionen in quantenmechanischen Modellen (Lehmann-Darstellung) auf. Dies liegt an der ähnlichen Struktur der Zustandssumme. Klassisch mit Transfermatrix V : !

$$Z_N = \text{tr } V^N \quad (7.23)$$

Quantenmechanik nach Zerlegung in imaginäre Zeitschritte:

Analogon
(aber Transfer in
"Richtung beta",
nicht in räuml. Richtung)

$$Z = \text{tr } e^{-\beta H} = \text{tr } \left(e^{-\frac{\beta}{N} H} \right)^N \quad (\text{Zahl "N" groß, beliebig}) \quad (7.24)$$

*(Und auch mit der MC-Zeitentwicklung: Operator $(\mathcal{P})^{t/\tau}$
 ↳ "Grundzustand" Π
 Exp. Aufkl.zeit $(E_1 - E_0)^t$*

7.4.1 Einplatz-Operator in Transfermatrix

in 2. Bes: $S_0 \approx \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$

Für den Erwartungswert eines ^(Matrix) lokalen Operators A_j (z.B. $A_j = S_0$) gilt:

$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr} AV^N}{\text{tr} V^N} \quad \text{für Platz } 0 \quad (7.25) \quad \text{(analog zu (7.6))}$$

Mittels der Spektraldarstellung von V

$$V = \sum_i \lambda_i |v_i\rangle \langle v_i| \quad \text{Bra-Ket-Notation hier sehr praktisch...} \quad (7.26)$$

ergibt sich:

$$\langle A_0 \rangle = \frac{1}{\sum_k \lambda_k^N} \sum_j \langle v_j | A_0 \left(\sum_{i_1} \lambda_{i_1} |v_{i_1}\rangle \langle v_{i_1}| \right) \left(\sum_{i_2} \lambda_{i_2} |v_{i_2}\rangle \langle v_{i_2}| \right) \dots |v_j\rangle \quad (7.27)$$

$$= \frac{1}{\sum_k \lambda_k^N} \sum_j \langle v_j | A_0 |v_j\rangle \lambda_j^N \quad \delta_{i_1 i_2} \quad \delta_{i_2 i_3} \quad \dots \quad (7.28)$$

$$= \frac{1}{\sum_k \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0}\right)^N} \sum_j \langle v_j | A_0 |v_j\rangle \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0}\right)^N \quad (7.29)$$

Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ verbleibt wiederum nur der größte Eigenwert und es ergibt sich:

$V = \sum_i \lambda_i |v_i\rangle \langle v_i|$

$$\langle A_0 \rangle = \langle v_0 | A_0 |v_0\rangle \quad (7.30)$$

(analog bei $e^{-\beta H}$: Grundzustand $|v_0\rangle$)

7.4.2 Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion in Transfermatrix

Analog ergibt sich für zwei Operatoren A, B an den Plätzen 0 und R mittels Einsetzen der Spektraldarstellung von V :

gilt: $A = \begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix} = B$

$$\langle A_0 B_R \rangle = \frac{1}{\text{tr} V^N} \text{tr} (A_0 V^R B_R V^{N-R}) \quad \lambda_{i_1} \dots \lambda_{i_R} \lambda_{i_{R+1}} \dots \lambda_{i_{N-R}} \quad (7.31)$$

$$= \frac{1}{\sum_k \lambda_k^N} \sum_j \sum_{i_1 \dots i_R} \sum_{k_1 \dots k_{N-R}} \langle v_j | A_0 |v_{i_1}\rangle \langle v_{i_1} |v_{i_2}\rangle \dots \langle v_{i_R} | B_R |v_{k_1}\rangle \langle v_{k_1} | \dots |v_j\rangle \quad \text{analog zu (7.6)}$$

$$= \frac{1}{\sum_k \lambda_k^N} \sum_{ij} \langle v_j | A_0 |v_i\rangle \langle v_i | B_R |v_j\rangle \lambda_i^R \lambda_j^{N-R} \quad (7.33)$$

Im thermodynamischen Limes verbleibt nur der Term $j = 0$ und es ergibt sich

$$\langle A_0 B_R \rangle = \sum_i \langle v_0 | A_0 |v_i\rangle \langle v_i | B_R |v_0\rangle \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0}\right)^R \quad (7.34)$$

Der Summand mit $i = 0$ ergibt $\langle A_0 \rangle \langle B_R \rangle$, wodurch sich die verbundene Korrelationsfunktion G schreiben lässt als: im thermodyn. Limes

$$G = \langle A_0 B_R \rangle - \langle A_0 \rangle \langle B_R \rangle = \sum_{i>0} \langle v_0 | A_0 |v_i\rangle \langle v_i | B_R |v_0\rangle \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0}\right)^R \quad (7.35)$$

analog zur Lehmann-Darstellung in der QM

Für den Spezialfall $B = A^\dagger$ wird aus Glg. 7.35:

$$G_{A,A^\dagger} = \sum_{i>0} |\langle v_0 | A | v_i \rangle|^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^R \quad (7.36)$$

$$= \sum_{i>0} c_i e^{-\frac{R}{\xi_i}} \quad (7.37)$$

reell, ≥ 0
analog MC
analog Zerfall, mit $e^{-\xi \cdot t}$

Die verbundene Korrelationsfunktion ist damit eine Summe von abfallenden Exponentialfunktionen mit Korrelationslängen:

$$\xi_i = \frac{1}{\log \frac{\lambda_0}{\lambda_i}} \quad (7.38)$$

Die größte Längenskala/Korrelationslänge ist daher

$$\xi = \frac{1}{\log \frac{\lambda_0}{\lambda_1}} \quad (7.39)$$

der Transformatrix

Die Korrelationslänge ist damit bestimmt durch das Verhältnis des größten und zweitgrößten Eigenwerts. Ähnliches (größter und zweitgrößter Eigenwert) ergibt sich bei:

- Quantenmechanik: Gap-Energie zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand
- Markov-Ketten: Autokorrelationszeit ~~anhand~~ durch zweitgrößten Eigenwert der Markov-Matrix bestimmt *Größe*

Für das Beispiel des 1D-Ising-Modells ergibt sich für die Eigenvektoren von V :

$$v_0 = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} \quad v_1 = \begin{pmatrix} \sin \varphi \\ -\cos \varphi \end{pmatrix} \quad (7.40)$$

mit

$$\varphi = e^{2\beta J} \sinh \beta h \quad (7.41)$$

Damit ergibt sich für die Spin-Spin-Korrelationen: (Fall "h=0" hier symmetriegebrochen als $h \rightarrow 0$)

$$\langle S_0 S_R \rangle \stackrel{N \rightarrow \infty}{\simeq} \cos^2(2\varphi) + \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^R \sin^2(2\varphi) \quad (7.42)$$

$$G = \langle S_0 S_R \rangle - \langle S_0 \rangle \langle S_R \rangle = \left(\tanh(\beta J) \right)^R \sin^2(2\varphi) \quad (7.43)$$

Zusammenfassend: Die gesamte Thermodynamik steckt im größten Eigenwert λ_0 , die Korrelationslänge steckt im zweitgrößten Eigenwert λ_1 .

7.4.3 „Kritische Exponenten des 1D-Ising-Modells“

Für $T \rightarrow 0$ zeigen alle Größen eine exponentielle Abhängigkeit (statt einem potenzartigem Verhalten). Um dennoch kritische Exponenten zu bestimmen, kann man (statt $t = \frac{T-T_c}{T_c}$) definieren

$$t := e^{-2\beta J} \quad \text{ad hoc!} \quad (\text{Faktor 2 willkürlich!}) \quad (7.44)$$

und damit das exponentielle Verhalten in die Definition von t stecken. Es folgt damit:

$$\chi \propto e^{2\beta J} \stackrel{!}{=} t^{-\gamma} \quad \Rightarrow \gamma = 1 \quad (7.45)$$

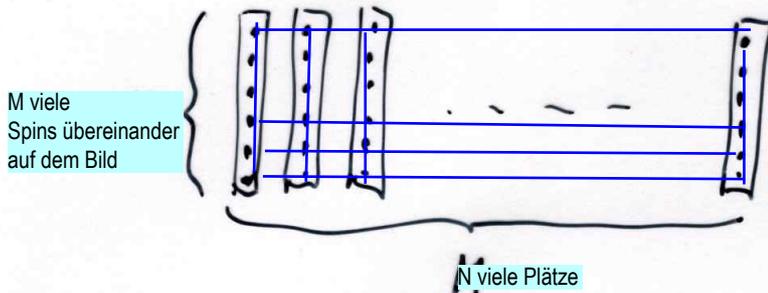
$$\xi \propto e^{2\beta J} \stackrel{!}{=} t^{-\nu} \quad \Rightarrow \nu = 1 \quad (7.46)$$

7.5 Verallgemeinerung von Transfermatrizen für „2D“-Systeme

(Gitter)

Fasse ein System der Größe $N \times M$ - mit q Freiheitsgraden pro Platz - als eine Kette von M Untersystemen der Größe $N \times 1$ auf. Jedes Untersystem hat dann $q \cdot N$ Freiheitsgrade. Die Transfermatrix hat dann statt $[q \times q]$ die Größe $[q^N \times q^N]$, der Aufwand steigt daher exponentiell mit der Breite des Systems.

Dieser Ansatz eignet sich besonders um Systeme zu ~~simulieren~~ ^{berechnen}, die schmal aber sehr lang sind ($M \gg N$). Der thermodynamische Limes kann lediglich für $M \rightarrow \infty$ erreicht werden, nicht jedoch für N . Für die Thermodynamik ist lediglich der größte Eigenwert von V relevant welcher somit effizient (z.B. mittels Lanczos-Verfahren) berechnet werden kann.



==> Transfermatrix hat die Größe $2^M \times 2^M$

--> numerisch behandeln für nicht zu große M , evtl. analytisch mit Mathematica, evtl. extrapolieren (z.B. mit FSS)

Exakte Physik --> V diagonalisieren

Nur Thermodynamik --> brauche im "thermodyn Limes" nur λ_0 (und dessen Ableitungen)