

Das Phasendiagramm des 3-Zustands- Pottsmodells

**Das Potts-Modell
= eine Erweiterung des Ising-Modells**

von Jessica Nathje

**TU Braunschweig
WS 04/05**

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Das Ising-Modell	2
1.1 Beispiele	2
1.2 Das Modell	3
3. Das Potts-Modell	5
2.1 Beispiel	5
2.2 Das Modell	6
4. Molekularfeldnäherung	7
3.1 Was ist das?	7
3.2 Bragg-Williams-Näherung für das Potts-Modell	8
3.3 Bragg-Williams-Näherung für das Ising-Modell	11
5. Die Transfermatrix-Methode in 1D	12
5.1 Ising-Modell	12
5.2 Potts-Modell	15
6. Ergebnis	18
7. Literaturverzeichnis	19

1. Einleitung

Das Potts-Modell und das Ising-Modell sind Modelle für Spin-Systeme. Im Folgenden werden zunächst diese beiden Modelle anhand einiger Beispiele vorgestellt.

Dabei soll gezeigt werden, dass diese Modelle eine gute Näherung für die Untersuchung einiger praktischer Probleme bieten.

Der Hauptteil dieser Arbeit beschäftigt sich mit Phasenübergängen.

Die beiden vorgestellten Modelle sollen sowohl mit der Molekularfeldnäherung als auch mit der Transfermatrix-Methode auf Phasenübergänge untersucht werden.

Ziel dieses Teils ist eine Bewertung der verwendeten Form der Molekularfeldnäherung zu der Frage, wann die Schlussfolgerungen aus der Näherung mit den exakten Ergebnissen übereinstimmen.

Dazu wird das Potts-Modell zunächst 1-dimensional unter Annahme der Bragg-Williams-Näherung, einer Form der Molekularfeldnäherung betrachtet. Mit Hilfe dieser Näherung soll festgestellt werden, ob es einen Phasenübergang gibt und, wenn dies der Fall sein sollte, auch welcher Ordnung der Phasenübergang ist. Da diese Anwendung für das Ising-Modell analog funktioniert, werden dafür nur die Ergebnisse der Bragg-Williams-Näherung angegeben.

Die Ergebnisse dieser Näherung werden mit der Transfermatrixmethode überprüft.

Für beide Modelle wird in 1 Dimension die Transfermatrix aufgestellt und daraus die Zustandssumme berechnet. Damit lässt sich dann feststellen, ob die vorherigen Ergebnisse tatsächlich zutreffen.

Abschließend wird aus den Ergebnissen der Rechnungen dargestellt, wann die Bragg-Williams-Näherung verwendet werden kann, und wann sie falsche Ergebnisse liefert.

Als Hintergrundliteratur liefert „Statistical Mechanics“ von Huang [1] in einfacher Darstellung die Grundlagen des Ising-Modells, so zum Beispiel auch die hier nicht betrachtete Lösung des 2-dimensionalen Ising-Modells. Zum Potts-Modell ist der Artikel „The Potts Model“ von Wu [2] sehr empfehlenswert. Dieser Artikel enthält wahrscheinlich alle Informationen über das Potts-Modell, die man suchen könnte. Weitere Literatur ist in Abschnitt 7 angegeben.

2. Das Ising-Modell

2.1 Beispiele

Zunächst werden wir zwei Beispiele betrachten, die man im Modell als Spinsysteme mit zwei möglichen Spinzuständen betrachten kann.

Beispiel 1:

Binäre Legierung

Betrachten wir einen Mischkristall aus zwei Komponenten:

Ein Beispiel dafür ist ein Kristall aus Zink und Kupfer, die im Kristall in kubisch-raumzentrierter Struktur angeordnet sind. D.h. im Zentrum von acht kubisch angeordneten Zink-Atomen befindet sich jeweils ein Kupfer-Atom:

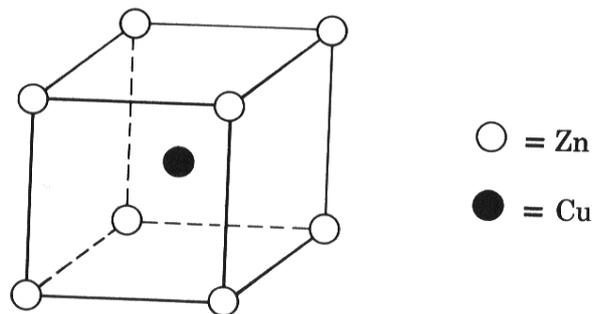


Abb. 1: Legierung aus Zn und Cu in bcc-Struktur [1]

Die Kristallstruktur zeigt ein temperaturabhängiges Verhalten:

Am absoluten Nullpunkt ist der Kristall vollständig geordnet, wie in Abb. 1 dargestellt.

Erhöht man die Temperatur, stellt man fest, dass die Zn-Atome mit den Cu-Atomen den Platz tauschen können. Die Wahrscheinlichkeit ein Zn-Atom am „richtigen“ Platz zu finden ist größer als $\frac{1}{2}$.

Erhöht man die Temperatur noch weiter findet man eine sogenannte kritische Temperatur, oberhalb derer die Wahrscheinlichkeit ein Zn-Atom am vorgesehenen Platz zu finden geringer ist. Sie beträgt genau $\frac{1}{2}$.

Man kann diesen Übergang zum Beispiel durch Bragg-Reflexion beobachten:

Unterhalb der kritischen Temperatur findet man ein Beugungsbild, das zwei verschiedene Sätze von Gitterebenen zeigt, die den Abstand d zueinander haben. Oberhalb der kritischen Temperatur beobachtet man nur noch ein Set von Gitterebenen, die den Abstand $d/2$ zueinander haben.

In diesem Beispiel entsprechen die zwei möglichen Spin-Zustände der Besetzung oder Nicht-Besetzung eines Gitterplatzes mit einem Zinkatom.

Diese beiden Zustände können mit ± 1 bezeichnet werden.

Beispiel 2:

Ferromagnete

Auch Ferromagnete zeigen ein temperaturabhängiges Verhalten:

Ferromagnete haben unterhalb der kritischen Temperatur T_c vollständig geordnete Bereiche, die Weiß'schen Bezirke. In diesen Bereichen zeigen alle magnetischen Momente in die gleiche Richtung, so dass es zu einer spontanen Magnetisierung kommt.

Bei der Überschreitung der kritischen Temperatur wird diese Ordnung zerstört. Die magnetischen Momente können sich beliebig ausrichten, das Material ist paramagnetisch.

In diesem Beispiel entsprechen die Spinzustände ± 1 der Orientierung der magnetischen Momente, wobei also vereinfachend angenommen wird, dass nur zwei verschiedene Ausrichtungen der Momente möglich sind.

2.2 Das Modell

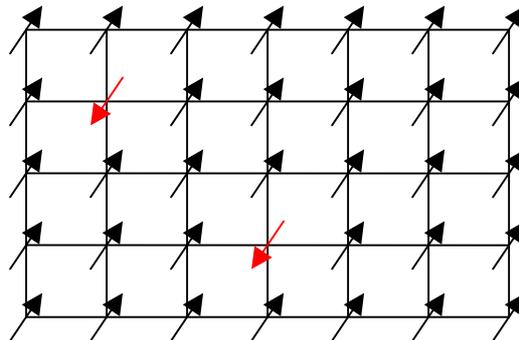


Abb. 2: 2-dimensionales Ising-Gitter

Ursprünglich wurde das Modell für das Beispiel der Ferromagnete entwickelt. Man betrachtet ein System mit N magnetischen Momenten, wobei jedem dieser Momente eine Spinvariable s_i zugeordnet wird. Diese Variable kann nur zwei verschiedene Werte annehmen:

$$s_i = \pm 1$$

\Rightarrow Das Ising-Modell beschreibt also Spin-Systeme, in denen nur zwei verschiedene Spinzustände möglich sind!

Die Energie eines derartigen Systems berechnet man mit:

$$H\{s_i\} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i \quad \text{Gl. 1-1}$$

In dieser Gleichung bezeichnet B ein externes Magnetfeld und J_{ij} die sogenannte Wechselwirkungsenergie.

Diese Wechselwirkungsenergie hängt davon ab, wie benachbarte Spins zueinander orientiert sind. Die Wechselwirkungsenergie zwischen benachbarten Paaren mit der gleichen Orientierung unterscheidet sich von der zwischen benachbarten Paaren mit unterschiedlicher Orientierung. Mit der Summe über $\langle ij \rangle$ ist also die Summe über alle benachbarten Paare gemeint.

Ein derartiges System ist in Abb. 2 dargestellt. In dem 2-dimensionalen Gitter sind die Momente in zwei verschiedene Richtungen angeordnet. Die Energie zwischen den nach unten zeigenden Spins und ihren direkten Nachbarn unterscheidet sich von der Energie zwischen zwei nach oben zeigenden Spins.

Im Folgenden betrachten wir nur isotrope Systeme, so dass man für die Wechselwirkungsenergie J_{ij} einfach J schreiben kann:

$$H\{s_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_{i=1}^N s_i$$

Gl. 1-2

Für ferromagnetische Systeme gilt $J > 0 \Rightarrow$ 

Für antiferromagnetische Systeme gilt $J < 0 \Rightarrow$ 

3. Das Potts-Modell

3.1 Beispiel

Adsorption von N_2 auf Graphit

Man betrachte eine monomolekulare Schicht N_2 auf Graphit.

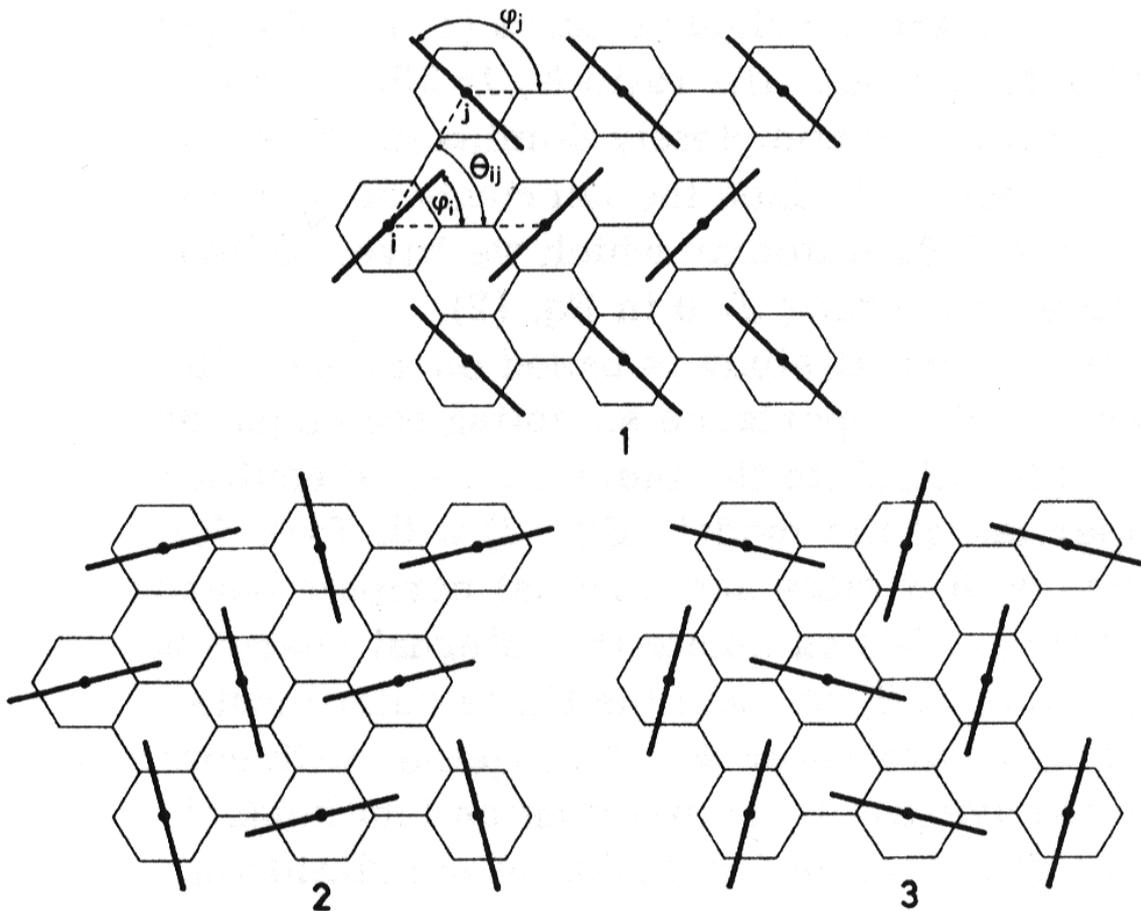


Abb. 3: Schematische Darstellung der drei möglichen Grundzustände des auf Graphit adsorbierten N_2 , aus [4]

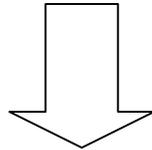
Auf einem hexagonalen Graphit-Gitter wird eine monomolekulare Schicht N_2 aufgebracht. Die Linien in Abb. 3 entsprechen der Längsachse der N_2 -Moleküle. Wie man sieht, gibt es für die Moleküle genau drei Möglichkeiten um sich auszurichten, nämlich die drei Raumrichtungen.

Problem:

- ⊗ Offenbar gibt es hier **drei** mögliche Zustände!
- ⊗ Das Ising-Modell passt nicht!

Ziel:

☺ Beschreibung von Systemen mit drei oder mehr möglichen Zuständen



3.2 Das Modell

Zur Beschreibung dieses Beispiels müssen wir zusätzliche Freiheitsgrade s_i einführen. Allgemein gilt das Potts-Modell für Systeme mit beliebig vielen Zuständen. Wir führen also q verschiedene Zustände s_i ein:

$$s_i = [1, 2, 3, \dots, q]$$

⇒ Im Potts-Modell kann jeder Gitterplatz q verschiedene Zustände annehmen!

Die Energie des Systems berechnet man mit:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{v_i, v_j} - 2B \sum_{i=1}^N (\delta_{v_i, 1})$$

Gl. 2-1

Da wir hier nicht mehr nur zwei verschiedene Zustände betrachten kann in der Summe nicht mehr einfach das Skalarprodukt der Spinvariablen auftauchen. Stattdessen wird hier das Kronecker δ verwendet, um in dem Wechselwirkungsterm die benachbarten Paare zu betrachten. Dabei werden mit $v_{i,j}$ die verschiedenen Zustände bezeichnet. Im Magnetfeldterm bezeichnet die 1 unter dem Kronecker- δ die Richtung an die das Magnetfeld gekoppelt ist.

⇒ Die Energie des Ising-Modells ist hier als Spezialfall $q = 2$ enthalten!

4. Molekularfeldnäherung

4.1 Was ist das?

grundlegende Annahme:

Die Wechselwirkung der übrigen Teilchen auf ein einzelnes speziell herausgegriffenes Teilchen wird durch ein *mittleres effektives Feld* ersetzt.

D.h., ein System aus wechselwirkenden Teilchen wird auf ein System ohne Wechselwirkung abgebildet!

Geschichte der Anwendung auf das Potts-Modell:

Die Molekularfeldnäherung wurde in der Vergangenheit bereits mehrfach auf das Potts-Modell angewendet.

Zuerst stellten *Kihara et al.* 1954 [3] für alle Systeme mit mehr als zwei möglichen Zuständen einen Phasenübergang 1. Ordnung fest. Dieses Ergebnis wurde aber als unrealistisch betrachtet und direkt wieder verworfen.

1974 betrachteten *Mittag* und *Stephen* [1] das Potts-Modell unter Molekularfeldnäherung und stellten fest, dass in 2 Dimensionen das Ergebnis von Kihara nicht immer falsch ist: In Systemen mit großen q gibt es tatsächlich einen Phasenübergang 1. Ordnung.

Man stellte dies durch Vergleich mit der exakten Lösung fest, die zeigte, dass es in zwei Dimensionen tatsächlich einen Übergang 1. Ordnung gibt, wenn $q > 4$.

Daraus ergab sich die Erwartung, dass ein kritischer Wert für q existiert.

Es soll also eine kritische Anzahl von Zuständen geben, für die in Abhängigkeit von der Dimension gilt, dass die Molekularfeldnäherung für alle Werte von q , die größer sind als der kritische Wert, die richtigen Ergebnisse liefert.

Oder mit kürzeren Worten:

⇒ **Erwartung:** Es gibt einen kritischen Wert $q_c(d)$, so dass die Molekularfeldnäherung für alle $q > q_c(d)$ gilt.

4.2 Bragg-Williams Näherung für das Potts-Modell

Wir betrachten ein System mit drei Zuständen!

Ziel: Wir wollen ausrechnen, ob es unter Annahme der Bragg-Williams-Näherung für dieses System zu einem Phasenübergang kommt und falls dies der Fall ist die Ordnung des Phasenübergangs feststellen.

Die folgende Rechnung erfolgt nach dem von Kihara [3] für das Ising-Modell verwendeten Weg.

Sei: N_i = Anzahl von Plätzen im i-ten Zustand
 z = Anzahl der direkten Nachbarn

Dann berechnet man die Energie des Systems mit:

$$E = \frac{zN}{4} J \left[1 - 2(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \right] \quad \text{Gl. 3-1}$$

In dieser Gleichung sind x_1, x_2, x_3 die Gitterplätze in den drei möglichen Zuständen von denen es jeweils N_i gibt. Das Quadrat kommt dabei aus der Einführung des mittleren effektiven Feldes.

Aus der Energie kann man die Entropie berechnen:

$$\begin{aligned} S &= k_B \cdot \ln Z - k_B \cdot \beta \cdot \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad \text{mit} \quad Z = \text{Sp}(e^{-\beta H}) \\ &= -k_B N [x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2 + x_3 \ln x_3] \end{aligned} \quad \text{Gl. 3-2}$$

Damit erhält man die Freie Energie:

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} &= \frac{(E - TS)}{N} \\ F &= \frac{zJ}{4} - \frac{zJ}{2} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) + k_B T (x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2 + x_3 \ln x_3) \end{aligned} \quad \text{Gl. 3-3}$$

Es gilt folgende Nebenbedingung:

$$\boxed{x_1 + x_2 + x_3 = 1} \quad \text{Gl. 3-4}$$

Mit der Funktion F und der Nebenbedingung lässt sich die Lagrange-Gleichung bilden. Es handelt sich dabei offensichtlich um eine quadratische Gleichung, die zwei verschiedene Lösungen hat, die wir hier mit α und β bezeichnen wollen.

⇒ Man hat nur einen Zustand, der sich von den anderen beiden unterscheidet:

$$x_1 = \alpha \quad x_2 = x_3 = \beta \quad \text{Gl. 3-5}$$

Diese Beziehung lässt sich auch anders formulieren:

$$x_1 - \sigma = x_2 = x_3 \Rightarrow x_1 = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}\sigma, \quad x_2 = x_3 = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\sigma \quad \text{Gl. 3-6}$$

Dabei ist σ der Ordnungsparameter.

Die Ausdrücke für x_1 , x_2 und x_3 werden in Gleichung 3-3 eingesetzt, so dass wir die Freie Energie in Abhängigkeit vom Ordnungsparameter σ erhalten:

$$F = \frac{1}{12}(Jz - 4Jz\sigma^2 - 12kT \ln(3) + \quad \text{Gl. 3-7}$$

$$+ 4kT \left(2\sigma \ln \left(-2 - \frac{3}{\sigma - 1} \right) + 2 \ln(1 - \sigma) + \ln(1 + 2\sigma) \right))$$

Am Phasenübergang gelten folgende Randbedingungen:

$$F|_{\sigma=\sigma_c} = F|_{\sigma=0} \quad \text{Gl. 3-8}$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \sigma} \right|_{\sigma=\sigma_c} = 0 \quad \text{Gl. 3-9}$$

Dabei entspricht $\sigma = 0$ der ungeordneten Phase und $\sigma \neq 0$ der geordneten Phase.

Gleichung 3-9 ergibt:

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \sigma} \right|_{\sigma=\sigma_c} = -\frac{2}{3} \left[zJ\sigma_c - kT_c \ln \left(-2 - \frac{3}{\sigma_c - 1} \right) \right] \quad \text{Gl. 3-10}$$

Diese Gleichung kann man nach T_c auflösen:

$$T_c = \frac{zJ}{2k \ln(2)} \sigma_c \quad \text{Gl. 3-11}$$

Der Ausdruck für die kritische Temperatur eingesetzt in Gleichung 3-7 ergibt:

$$F(\sigma)|_{T=T_c} = \frac{1}{12 \ln(2)} (zJ \ln(2) - 4zJ\sigma^2 \ln(2) - \quad \text{Gl. 3-12}$$

$$- 6k\sigma \left\{ 2\sigma \ln \left(-2 - \frac{3}{\sigma - 1} \right) + 2 \ln(1 - \sigma) + \ln(1 + 2\sigma) \right\})$$

Darauf wenden wir nun die Randbedingung Gleichung 3.8 an und lösen den Ausdruck, der sich dabei ergibt, nach σ_c auf:

$$\sigma_c = \frac{1}{2} \quad \text{Gl. 3-13}$$

Wir bestimmen nun noch die latente Wärme:

$$\frac{\Delta E}{N} = \frac{1}{N} \left\{ [E]_{\sigma=0} - [E]_{\sigma=\sigma_c} \right\} = \frac{zJ}{12} \quad \text{Gl. 3-14}$$

Offenbar verschwindet die latente Wärme am Übergang nicht. Das heißt, es gibt einen Phasenübergang 1. Ordnung.

⇒ Für $q = 3$ führt die Bragg-Williams-Näherung auf einen Phasenübergang 1. Ordnung!

Die Randbedingungen lassen sich auch graphisch auswerten:

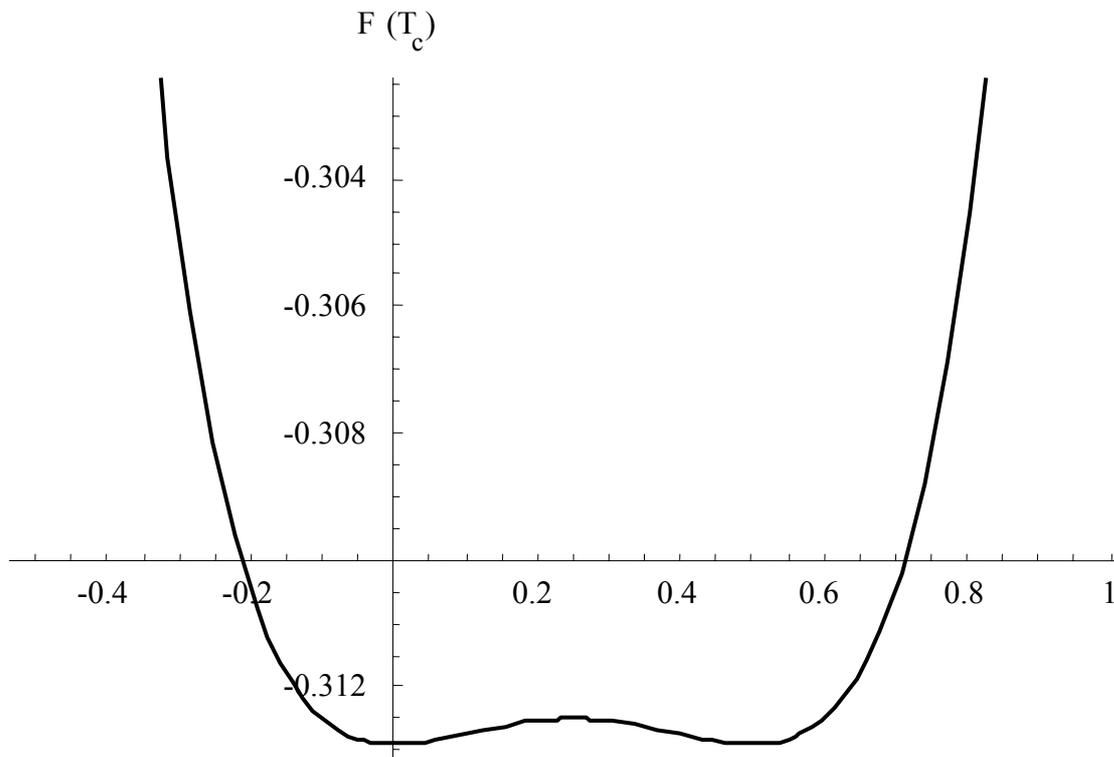


Abb. 4: Bestimmung von σ_c

In Abb. 4 ist die Freie Energie an der Stelle $T = T_c$ über dem Ordnungsparameter σ aufgetragen. Der Graph hat zwei Minima, das Hoch-Temperatur-Minimum für die ungeordnete Phase bei $\sigma = 0$ und das Tief-Temperatur-Minimum für die geordnete Phase. Der Abstand der beiden Minima beträgt genau $\frac{1}{2}$, also den Wert von σ_c .

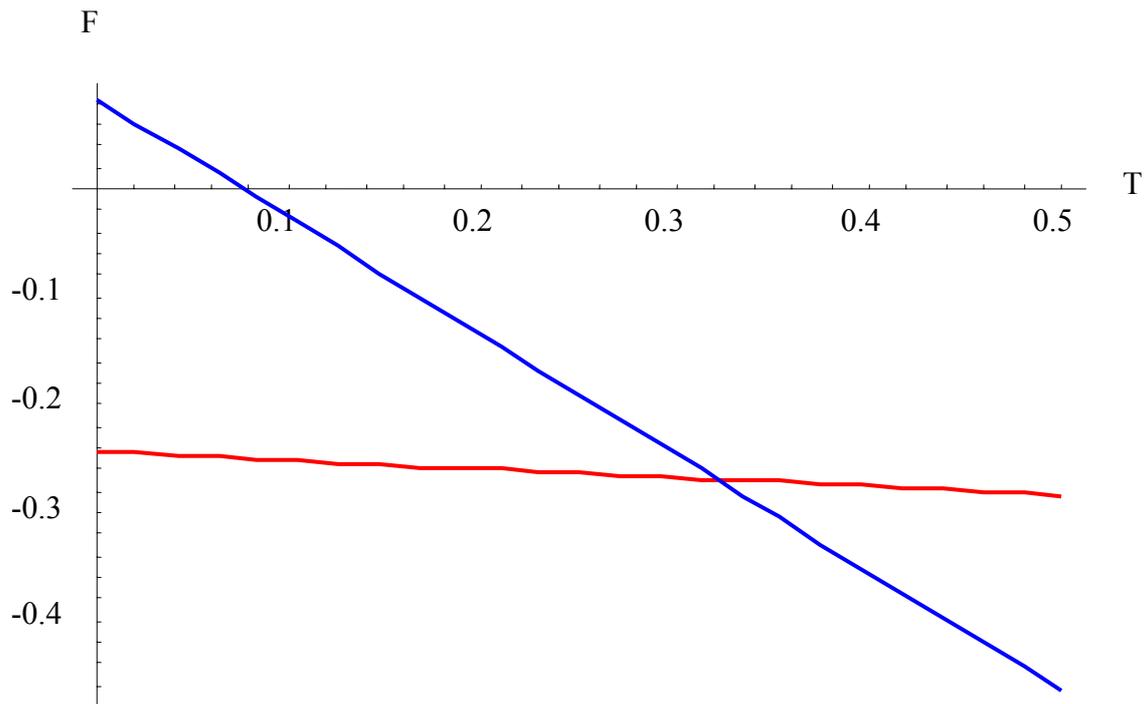


Abb. 5: Freie Energie über der Temperatur für $\sigma = 0$ (die obere Gerade) und $\sigma \neq 0$ (die untere Gerade)

In Abb. 5 wird die erste der Randbedingungen dargestellt: Die obere Gerade zeigt die Freie Energie für $\sigma = 0$ und die untere Gerade für $\sigma \neq 0$. Für die Auftragung von F für $\sigma \neq 0$ wurde T_c variiert, so dass das davon abhängige σ_c gegen 1 geht. Der Schnittpunkt der beiden Geraden entspricht dann genau dem errechneten Wert von T_c .

4.3 Bragg-Williams-Näherung für das Ising-Modell

Wir betrachten ein System mit zwei Zuständen!

Die Vorgehensweise funktioniert genau analog zu der gerade für das Potts-Modell dargestellten Methode. Daher wird hier nur auf das Ergebnis verwiesen, das wir später mit der exakten Lösung vergleichen möchten. (Rechnung zum Beispiel siehe [2], [3])

Für $q=2$ führt die Bragg-Williams-Näherung auf einen Phasenübergang 2. Ordnung.

5. Die Transfermatrix-Methode in 1D

5.1 Ising-Modell

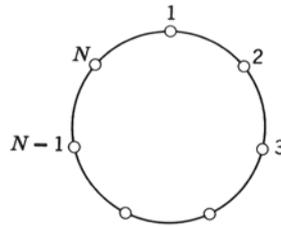


Abb. 6: 1-dimensionale Kette

Ziel: Berechnung einer Zustandssumme (nach [2]) die nicht mehr von den Spinvariablen abhängig ist

Die Energie des Systems lautet für den 1-dimensionalen Fall:

$$H\{s_i\} = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - B \sum_{i=1}^N s_i \quad \text{Gl. 4-1}$$

Daraus berechnen wir die Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z &= Sp(\text{Exp}[-\beta \cdot H]) \quad \text{Gl. 4-2} \\ &= \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \text{Exp}[\beta \cdot J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + \beta \cdot B \sum_{i=1}^N \frac{1}{2}(s_i + s_{i+1})] \end{aligned}$$

Die Zustandssumme kann man als Matrix formulieren, indem man als Spinvariablen ± 1 verwendet und die Matrix nach $\begin{pmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{pmatrix}$ besetzt:

$$\text{Transfermatrix} = T = \begin{pmatrix} \text{Exp}[\beta \cdot (J + B)] & \text{Exp}[-\beta \cdot B] \\ \text{Exp}[-\beta \cdot B] & \text{Exp}[\beta \cdot (J - B)] \end{pmatrix} \quad \text{Gl. 4-3}$$

Da wir eine geschlossene Kette betrachten gilt:

$$Z = Sp(T^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad \text{Gl. 4-4}$$

Dabei sind λ_i die Eigenwerte der Matrix.

Für die Eigenwerte erhält man hier:

$$\lambda_{1,2} = \text{Exp}[\beta J] \cdot \left[\text{Cosh}[\beta B] \pm \sqrt{\text{Sinh}^2[\beta B] + \text{Exp}[-4\beta J]} \right] \quad \text{Gl. 4-5}$$

Wir betrachten den Fall $N \rightarrow \infty$. Dann gilt $Z \rightarrow \lambda_1^N$, wobei λ_1 den größeren der beiden Eigenwerte bezeichnet. Man erhält also:

$$Z = (\text{Exp}[\beta J] \cdot [\text{Cosh}[\beta B] + \sqrt{\text{Sinh}^2[\beta B] + \text{Exp}[-4\beta J]}])^N \quad \text{Gl. 4-6}$$

Mit der Transfermatrix erhält man also nach nur kurzer Rechnung einen Ausdruck für die Zustandssumme, in dem die Spinvariablen nicht mehr enthalten sind, sondern der nur noch von der Wechselwirkungsenergie und dem externen magnetischen Feld abhängt.

Aus der Zustandssumme wird nun die Magnetisierung berechnet:

$$M = \frac{\partial}{\partial B} \frac{1}{\beta} \ln Z = \frac{\text{Sinh}[\beta B]}{\sqrt{\text{Sinh}^2[\beta B] + \text{Exp}[-4\beta J]}} \quad \text{Gl. 4-7}$$

Die Magnetisierung verschwindet offensichtlich, wenn das äußere Magnetfeld Null wird. Das heißt, es gibt keine spontane Magnetisierung!

⇒ In 1 Dimension hat das Ising-Modell keinen Phasenübergang bei $T > 0$!

Magnetisierungskurve:

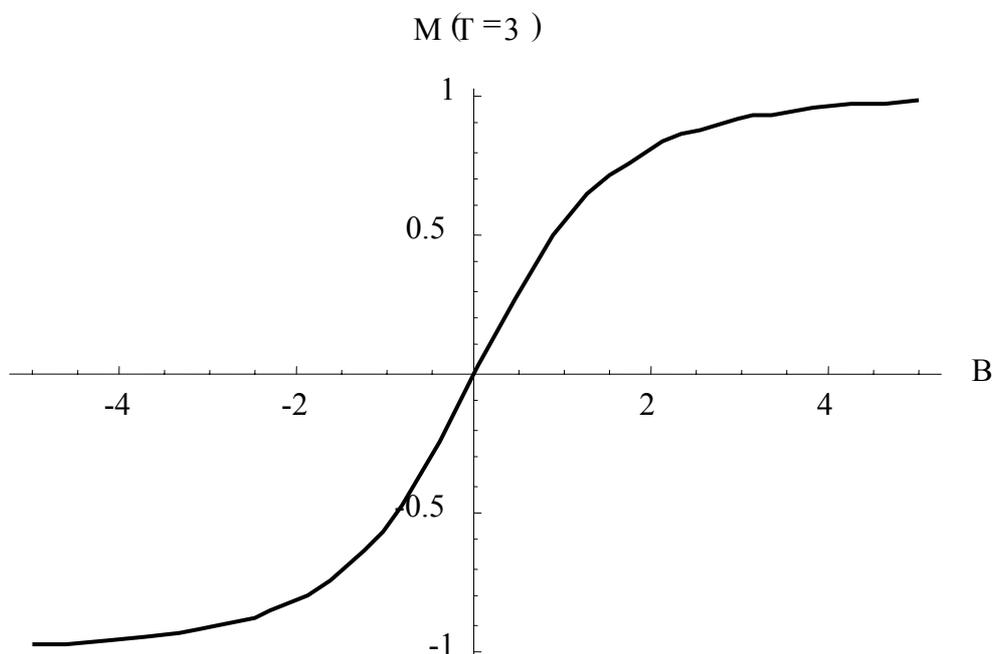


Abb. 6: Magnetisierung für das 1-dim. Ising-Modell

Die graphische Darstellung der Magnetisierung in Abhängigkeit vom Magnetfeld (Abb. 6) zeigt, dass die Magnetisierung für $B = 0$ verschwindet. Die Kurve weist keine Unstetigkeiten auf, das heißt, es gibt keinen Phasenübergang 1. Ordnung.

Betrachte außerdem die spezifische Wärme:

Die spezifische Wärme berechnet man mit:

$$C_V = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \frac{1}{\beta} \ln Z \quad \text{Gl. 4-8}$$

Der Ausdruck für die spezifische Wärme, den man dann erhält, ist sehr umfangreich und wird daher nicht explizit angegeben.

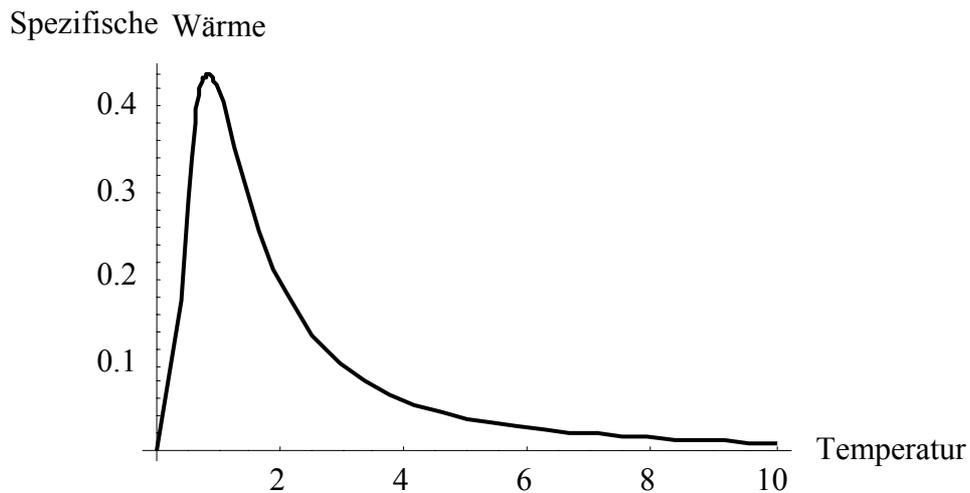


Abb. 7: Spezifische Wärme in Abhängigkeit von der Temperatur

Abbildung 7 zeigt, dass die spezifische Wärme für $T \rightarrow 0$ ebenfalls Null wird. Die Kurve zeigt keine Anomalien, so dass offensichtlich auch kein Phasenübergang 2. Ordnung vorliegt.

5.2 Potts-Modell

In einer Dimension lautet die Hamilton-Funktion für das Potts-Modell:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \delta_{\nu_i, \nu_{i+1}} - B \sum_{i=1}^N (\delta_{\nu_i, 1} + \delta_{\nu_{i+1}, 1}) \quad \text{Gl. 4-9}$$

Die Zustandssumme lautet damit:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Sp}(\text{Exp}[-\beta \cdot H]) \quad \text{Gl. 4-10} \\ &= \sum_{s_1} \sum_{s_2} \Lambda \sum_{s_N} \text{Exp}[\beta \cdot \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \delta_{\nu_i, \nu_{i+1}} + \beta \cdot B \sum_{i=1}^N (\delta_{\nu_i, 1} + \delta_{\nu_{i+1}, 1})] \end{aligned}$$

Die drei Zustände werden mit $\nu_i = 0, 1, 2$ bezeichnet, so dass man folgende Transfermatrix erhält:

$$T = \begin{pmatrix} \text{Exp}[\frac{\beta J}{2} + 2\beta B] & \text{Exp}[\beta B] & \text{Exp}[\beta B] \\ \text{Exp}[\beta B] & \text{Exp}[\frac{\beta J}{2}] & 1 \\ \text{Exp}[\beta B] & 1 & \text{Exp}[\frac{\beta J}{2}] \end{pmatrix} \quad \text{Gl. 4-11}$$

Analog zur Vorgehensweise beim Ising-Modell bestimmen wir die Eigenwerte dieser 3 x 3-Matrix. Diese lauten:

$$\lambda_1 = e^{\frac{\beta J}{2}} - 1 \quad \text{Gl. 4-12}$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(1 + e^{\frac{\beta J}{2}} + e^{2\beta B + \frac{\beta J}{2}} \pm \sqrt{1 + 8e^{2\beta B} + 2e^{\frac{\beta J}{2}} + e^{\beta J} - 2e^{2\beta B + \frac{\beta J}{2}} - 2e^{2\beta B + \beta J} + e^{4\beta B + \beta J}} \right) \quad \text{Gl. 4-13}$$

Wir betrachten auch hier den Fall $N \rightarrow \infty$ und erhalten für die Zustandssumme:

$$Z = \left(\frac{1}{2} \left[1 + e^{\frac{\beta J}{2}} + e^{2\beta B + \frac{\beta J}{2}} + \sqrt{1 + 8e^{2\beta B} + 2e^{\frac{\beta J}{2}} + e^{\beta J} - 2e^{2\beta B + \frac{\beta J}{2}} - 2e^{2\beta B + \beta J} + e^{4\beta B + \beta J}} \right] \right)^N \quad \text{Gl. 4-14}$$

Betrachtung der Spezifischen Wärme:

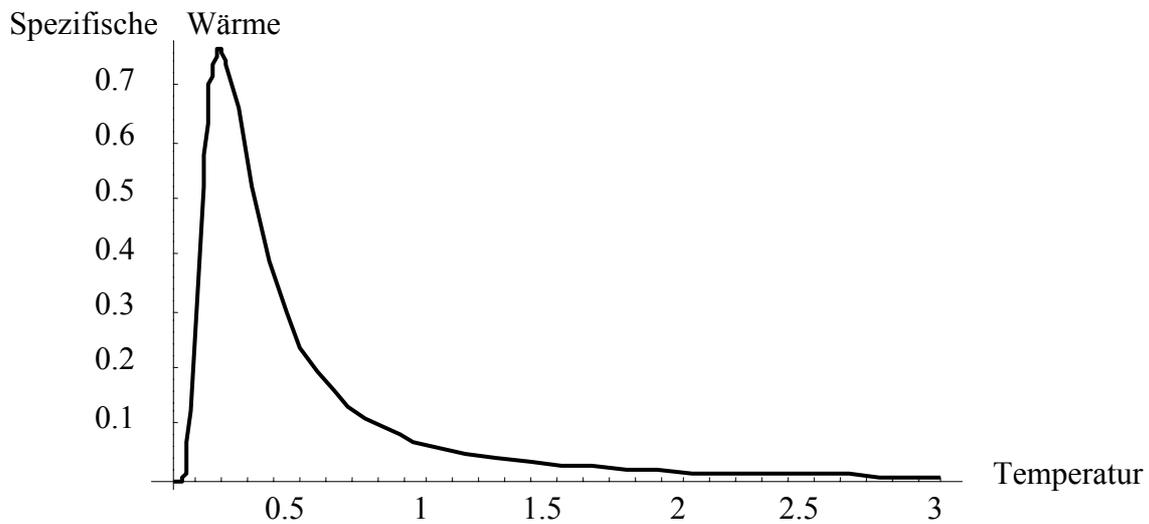


Abb. 8: Spezifische Wärme über der Temperatur für das Potts-Modell

Auch für das Potts-Modell erhält man für die spezifische Wärme in Abhängigkeit von der Temperatur eine Kurve, die keine Anomalien aufweist. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass es keinen Phasenübergang gibt.

Betrachte außerdem die Magnetisierung:

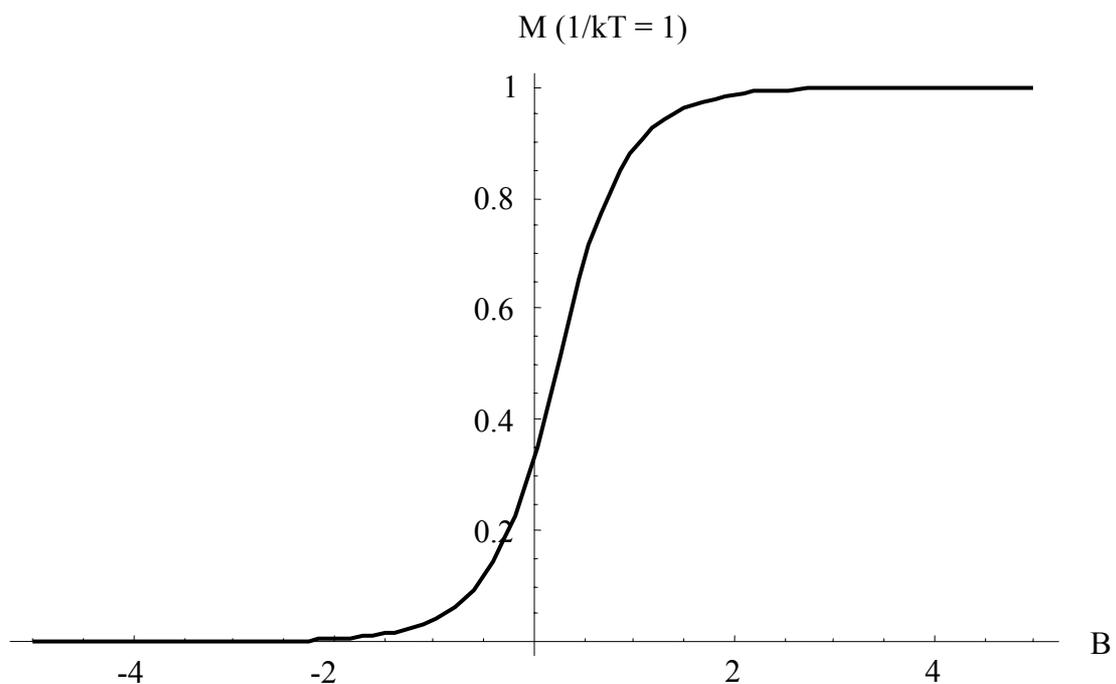


Abb. 9: Magnetisierung im 1-dimensionalen Potts-Modell

Nachdem die spezifische Wärme deutlich darauf hinweist, dass es keinen Phasenübergang gibt, ist es auf den ersten Blick überraschend, dass die Magnetisierung für $B = 0$ nicht verschwindet, sondern den Wert $M = 1/3$ annimmt.

Hier ist das aber kein Hinweis auf einen Phasenübergang, sondern eine Folge davon, dass das externe Magnetfeld, das für die Berechnung angenommen wurde, an eine der drei Spinrichtungen gekoppelt ist. Es gibt keine Vorzugsrichtung, sondern alle Richtungen sind gleich wahrscheinlich. Da diese drei Richtungen also nicht miteinander korreliert sind, bleibt beim Abschalten des Magnetfelds eine Magnetisierung erhalten.

⇒ Das Potts-Modell hat in 1D keinen Phasenübergang bei $T > 0$!

6. Ergebnis

Die Bragg-Williams-Näherung ergab folgende Ergebnisse:

Man erhält für das Potts-Modell einen Phasenübergang 1. Ordnung und für das Ising-Modell einen Phasenübergang zweiter Ordnung.

Die Transfermatrix-Methode hat aber in 1D gezeigt, dass es in beiden Fällen keinen Phasenübergang bei $T > 0$ gibt!

Wir sind also wieder bei der ursprünglichen Frage angelangt, wann die Bragg-Williams-Näherung auf die richtige Lösung führt.

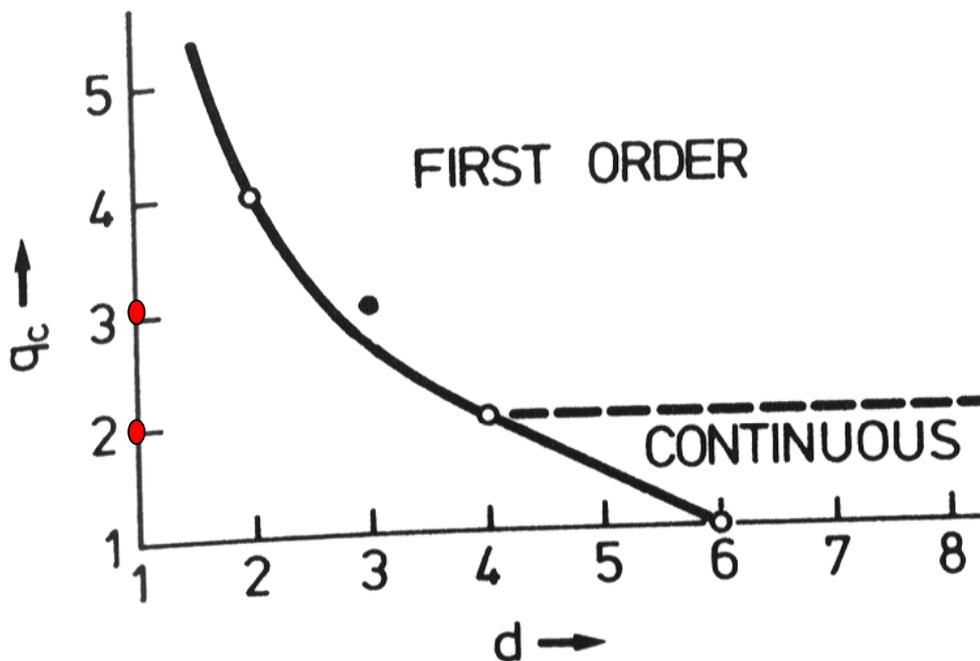


Abb. 10: Zusammenhang von d und q_c , aus [1]

Abbildung 10 zeigt den Zusammenhang zwischen der Dimension und der Anzahl der möglichen Zustände.

Das Diagramm stammt aus einem Artikel von 1982 [1]. Die offenen Punkte zeigen die damals bekannten Ergebnisse an:

- $q_c(d_c = 4) = 2$
- $d_c(q_c = 4) = 2$

Die roten Punkte bei $d=1$ bezeichnen die Ergebnisse der gezeigten Transfermatrix-Rechnung. Der geschlossene Punkt bei $q = 3$ und $d = 3$ war bei der Entstehung des Diagramms noch nur eine Vermutung. Inzwischen hat man festgestellt, dass für $q = 3$ in drei Dimensionen tatsächlich ein Phasenübergang 1. Ordnung stattfindet [5].

Das führt uns auf die folgende Schlussfolgerung:

⇒ Je größer die Dimension d oder die Anzahl der Zustände q , desto besser „passt“ die Bragg-Williams-Näherung

7. Literaturverzeichnis

- [1]: Wu: "The Potts model",
aus Reviews of Modern Physics, Vol. 54, No. 1
Januar 1982
- [2]: Huang: "Statistical Mechanics",
Verlag John Wiley & Sons, 2. Auflage, 1987
- [3]: Kihara, Midzuno und Shizume:
„Statistics of Two-Dimensional Lattices with Many
Components“
aus Journal of the Physical Society of Japan Vol. 9, No. 5,
Sep.-Oct., 1954
- [4]: Mouritsen und Berlinsky:
"Fluctuation-Induced First-Order Phase Transition in an
Anisotropic Planar Model of N₂ on Graphite",
aus Physical Review Letters, 48, Nr. 3
- [5]: www.physik.uni-bielefeld.de/~iskos/Projekte/Spinmodelle/pot...