

Näherungsansätze zum Ising-Modell nach einer neueren Diagrammentwicklung II

H. HARTMANN und H. P. NEUMANN

Institut für Physikalische Chemie der Universität Frankfurt am Main

(Z. Naturforschg. 22 a, 613—619 [1967]; eingegangen am 16. September 1966)

Die FOURIER-Nullkomponente der Bindungsmatrix $G_{ij} = G(0)$ in ¹ Beziehung (5.16) wurde durch Summation spezieller Diagramme in der sogen. „Kettenapproximation“ und der „Wassermelonenapproximation“ näherungsweise berechnet. Auf der Basis von (5.16) in ¹ wurde in der Kettenapproximation und der Wassermelonenapproximation die magnetische Suszeptibilität und die Magnetisierung des dreidimensionalen ISING-Modells bestimmt. In der Kettenapproximation wurden ferner die freie Energie, die innere Energie und die Atomwärme des dreidimensionalen ISING-Ferromagneten sowie die Druck-Dichte-Isothermen des dreidimensionalen Gittergases ausgerechnet.

In neuerer Zeit sind einige Näherungsverfahren zur Berechnung der Zustandsgrößen realer Gase entwickelt und teilweise numerisch angewandt worden, die auf Clusterentwicklungen der radialen Verteilungsfunktion basieren. Eines dieser Näherungsverfahren ² beruht auf dem Prinzip, in der Diagrammentwicklung der radialen Verteilungsfunktion nur diejenigen Diagramme zu berücksichtigen, die sich durch Reihen- und Parallelschaltung aus einem einzigen Elementardiagramm erzeugen lassen (Convolutionapproximation).

Es wurde nun gezeigt ¹, daß sich auch für die magnetische Suszeptibilität χ des ISING-Modells eine ähnliche Diagrammentwicklung angeben läßt. Sie schreibt sich:

$$\chi = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} M_{n+1} G^{nm}(0) M_{m+1} + M_2 \quad (1)$$

oder in Matrixform:

$$\chi = M^+ G(0) M^+ + M_2 \quad (1 a)$$

mit
$$G(0) = \sum_{i+j=1}^V G_{ij}.$$

Das Matricelement G_{ij}^{nm} der unendlichen Matrix G_{ij} ist dabei die Summe aller vertexirreduziblen Diagramme ¹, die mit n Linien an Fixpunkt i und m Linien an Fixpunkt j aufgehängt sind.

Die Convolutionapproximation kann zur Berechnung von G_{ij} verwendet werden. (5.20) und (6.8) in ¹ sind die Fundamentalgleichungen der Convolutionapproximation.

In den folgenden Abschnitten werden in Analogie zur Theorie der radialen Verteilungsfunktion ^{2, 3} für

G_{ij} bzw. χ mit einer einfachen Bindung als Elementardiagramm Näherungsformeln in der Ketten- bzw. Wassermelonenapproximation aufgestellt und numerisch behandelt.

Die Semiinvarianten in den Diagrammen aus G_{ij}^{nm} sind zunächst natürlich nur durch das Gleichungssystem (3.3) in ¹ bestimmt. Bei der Ketten- und Wassermelonenapproximation werden für die Semiinvarianten durchweg Näherungsansätze der Form (42) aus ⁴ benutzt.

Die magnetische Suszeptibilität ist von unmittelbarer Bedeutung für das Schwankungsquadrat der Magnetisierung, welches mit ihr gemäß

$$\frac{\chi}{V} = \langle M_1^2 \rangle - \langle M_1 \rangle^2 \quad (2)$$

verknüpft ist.

In günstig gelagerten Fällen kann man aus der Suszeptibilität durch einfache Differentiationen und Integrationen alle wichtigen thermodynamischen Funktionen des ISING-Modells gewinnen. Dieser Weg wurde besonders im Fall der Kettenapproximation besprochen.

Die Kettenapproximation

In Abb. 1 ist als Beispiel ein Kettendiagramm aus fünf einfachen Bindungen dargestellt.

Die Summe aller Kettendiagramme aus n einfachen Bindungen mit den Fixpunkten (i, j) liefert zu G_{ij} den Beitrag

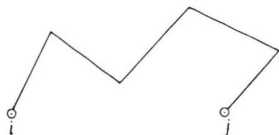
$${}_n T_{ij}^{11} = (M_2)^{n-1} \sum_{k,l,m,n,r} (\beta v_{ik}) (\beta v_{kl}) (\beta v_{lm}) \cdot (\beta v_{mn}) \dots (\beta v_{rj}). \quad (3)$$

¹ F. ENGLERT, Phys. Rev. 129, 567 [1963].

² J. M. J. v. LEEUWEN, J. GROENEVELD u. J. DE BOER, Physica 25, 792 [1959].

³ A. MÜNSTER, Statistische Thermodynamik, Berlin 1956.

⁴ H. HARTMANN u. H. P. NEUMANN, Z. Naturforschg. 22 a, 604 [1967], Teil I.

Abb. 1. Kettendiagramm mit den Fixvertexen i und j .

Summiert man noch über den Index j , so erhält man die FOURIER-Nullkomponente ${}_n T^{11}(0)$ von ${}_n T_{ij}^{11}$, welche sich wesentlich bequemer auswerten läßt als (3). Es ergibt sich

$${}_n T^{11}(0) = (M_2)^{n-1} (\beta v(0))^n. \quad (4)$$

Summiert man nun noch über alle n von $n=2$ bis $n=\infty$ (eine Kette besteht aus mindestens zwei Bindungen), so erhält man den Beitrag aller Kettendiagramme zu $G(0)$

$$T^{11}(0) = \frac{(\beta v(0))^2 M_2}{1 - \beta v(0) M_2}. \quad (5)$$

Dabei wurde $\beta v(0) M_2 \ll 1$ vorausgesetzt.

$T^{11}(0)$ ist das einzige von null verschiedene Matrixelement der unendlichen Matrix $T(0)$.

Mit Hilfe von (5) und (1) bzw. (1 a) erhält man für die magnetische Suszeptibilität in der Kettenapproximation

$$\chi = M_2 T^{11}(0) M_2 + M_2 = \frac{(\beta v(0))^2 (M_2)^3}{1 - \beta v(0) M_2} + M_2. \quad (6)$$

Für die weitere Behandlung von (6) ist entscheidend, welche Ansätze man für die Semiinvarianten in (6) benutzt. Setzt man die alleinstehende Semiinvariante in (6) null und macht man für die Semiinvarianten, die den beiden Fixvertexen entsprechen, den Ansatz $M_2(x) = 1/\beta v(0)$, für alle übrigen aber den Ansatz $M_2(x) = M_2^0(y^W(x))$, so ändert sich (6) ab in

$$\chi = \frac{M_2^0(y^W(x))}{1 - \beta v(0) M_2^0(y^W(x))} = \frac{1}{\cos^2 h y^W(x) - \beta v(0)}. \quad (7)$$

Dabei ist $y^W = \beta v(0) M_1^W(x) + x$ mit der Magnetisierung $M_1^W(x)$ des WEISSschen Modells. χ in (7) ist

die Suszeptibilität des WEISSschen Modells. Wegen der Magnetisierungsgleichung

$$M_1^W = \tanh[\beta v(0) M_1^W + x]$$

des WEISSschen Modells erhält man nämlich durch Differentiation

$$\begin{aligned} \frac{dM_1^W}{dx} &= \frac{(\beta v(0) (dM_1^W/dx) + 1)}{\cos^2 h y^W}, \\ \frac{dM_1^W}{dx} &= \frac{1}{\cos^2 h y^W - \beta v(0)}. \end{aligned} \quad (8)$$

Auf Grund der Definition

$$\chi = dM_1/dx \quad (9)$$

stimmt folglich (8) mit (7) überein.

Man kann die Ansätze für die Semiinvarianten, die von (6) zu (7) führten, noch etwas abändern. Auf diese Weise ergibt sich die Suszeptibilität eines modifizierten WEISSschen Modells.

Setzt man für die alleinstehende Semiinvariante in (6)

$$M_2(x) = M_2^0(y^W(x))$$

für die beiden den Fixvertexen entsprechenden Semiinvarianten

$$M_2(x) = \sqrt{5/4} \beta v(0) M_2^0(y^W(x))$$

und für alle übrigen Semiinvarianten wieder

$$M_2(x) = M_2^0(y^W(x))$$

so erhält man für die magnetische Suszeptibilität die Näherungsformel

$$\chi = \frac{\frac{5}{4} \beta v(0) [M_2^0(y^W(x))]^3}{1 - \beta v(0) M_2^0(y^W(x))} + M_2^0(y^W(x)). \quad (10)$$

Aus (9) ergibt sich durch unbestimmte Integration

$$M_1 = \int \chi dx + C. \quad (11)$$

Wendet man (11) auf (10) an, so führt dies auf ein schwer zugängliches Integral in der Variablen x . Durch die Variablensubstitution $x \rightarrow y^W(x)$ wird das Integral geschlossen integrierbar.

Es schreibt sich

$$M_1 = \int \frac{\cos^2 h y^W - \beta v(0)}{\cos^4 h y^W} dy^W + \frac{5}{4} \beta v(0) \int \frac{dy^W}{\cos^2 h y^W} + C. \quad (12)$$

Denn wegen (8) gilt

$$\frac{dy^W}{dx} = \beta v(0) \frac{dM_1^W}{dx} + 1 = \frac{\cos^2 h y^W}{\cos^2 h y^W - \beta v(0)}, \quad (13)$$

daraus folgt

$$M_1 = \int \chi dx + C = \int \chi(y^W) \frac{[\cos^2 h y^W - \beta v(0)]}{\cos^2 h y^W} dy^W + C. \quad (14)$$

Die unbestimmte Integration in (12) ist elementar, führt aber im einzelnen auf etwas umständliche Rechnungen. Als Endergebnis erhält man

$$M_1 = \tanh y^W + \beta v(0) \tanh(\frac{1}{2} y^W) \cdot \sum_{\nu=1}^5 \frac{G_\nu}{(1 + \tanh^2 h(\frac{1}{2} y^W))^\nu} \quad (15)$$

mit $y^W = \beta v(0) M_1^W + x$, $G_1 = 1/2$; $G_2 = -4$; $G_3 = 12$; $G_4 = -16$; $G_5 = 8$. (16)

Die Integrationskonstante C verschwindet wegen der Randbedingungen

$$M_1(H) = -M_1(-H), \quad M_1(\pm \infty) = \pm 1. \quad (17)$$

Die freie Energie f_c ergibt sich nun aus der Magnetisierung M_1 durch die unbestimmte Integration

$$-\beta f_c = \int M_1 dx + C. \quad (18)$$

Setzt man in (18) M_1 (15) ein und benutzt man wieder die Variablensubstitution $x \rightarrow y^W(x)$, so resultiert wegen (13) das unbestimmte Integral

$$-\beta f_c = \int \left[\tanh y^W + \beta v(0) \tanh(\frac{1}{2} y^W) \cdot \sum_{\lambda=2}^7 \frac{G_\lambda}{(1 + \tanh^2 h(\frac{1}{2} y^W))^\lambda} \right] \cdot \frac{\cosh y^W - \beta v(0)}{\cosh y^W} dy^W + C. \quad (19)$$

(19) ist ebenfalls geschlossen integrierbar. Eine etwas langwierige Rechnung, die aber keine grundsätzlichen Schwierigkeiten in sich birgt, führt auf den Ausdruck

$$-\beta f_c = \ln[\cosh y^W] - \frac{\beta v(0)}{2} \tanh^2 h y^W + \sum_{\lambda=2}^7 \frac{\hat{G}_\lambda}{(1 + \tanh^2 h(\frac{1}{2} y^W))^{\lambda-1}} + C \quad (20)$$

mit den Funktionen $\hat{G}_2 = -\frac{1}{2} [(\beta v(0))^2 - \beta v(0)]$, $\hat{G}_3 = \frac{1}{2} [5(\beta v(0))^2 - 3\beta v(0)]$,
 $\hat{G}_4 = -\frac{1}{3} [20(\beta v(0))^2 - 6\beta v(0)]$, $\hat{G}_5 = 10(\beta v(0))^2 - \beta v(0)$, (21)
 $\hat{G}_6 = -8(\beta v(0))^2$, $\hat{G}_7 = \frac{8}{3}(\beta v(0))^2$.

Die Integrationskonstante C in (20) wird wie in ⁴ durch die Randbedingung

$$\lim_{H \rightarrow \infty} f_c \rightarrow -(\frac{1}{2} v(0) + H)$$

festgelegt. – Es ergibt sich

$$C = \ln 2 - \beta v(0) \sum_{\lambda=2}^7 \frac{\hat{G}_\lambda}{2^{\lambda-1}}. \quad (22)$$

Mit Hilfe der Beziehungen ⁴

$$p(H) = -(f_c + v(0)/2 + H), \quad \varrho(H) = (1 - M_1)/2$$

erhält man wegen (20) und (22) für die Druck-Dichte- $(p - \varrho)$ -Isothermen die Parameterdarstellung

$$\beta p = \ln 2 + \ln[\cosh y^W] - x - \frac{\beta v(0)}{2} \cdot (1 + \tanh^2 h y^W) + \sum_{\lambda=2}^7 \hat{G}_\lambda \left[\frac{1}{(1 + \tanh^2 h(\frac{1}{2} y^W))^{\lambda-1}} - 1/2^{\lambda-1} \right], \quad (23)$$

$$\varrho = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh y^W - \beta v(0) \tanh(\frac{1}{2} y^W) \cdot \sum_{\nu=1}^5 G_\nu / (1 + \tanh^2 h(\frac{1}{2} y^W))^\nu \right].$$

Die innere Energie und die Atomwärme C_u lassen sich ebenfalls in geschlossener Form unter Benutzung der Formeln

$$\varepsilon = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f_c), \quad C_u = -k \beta^2 \frac{\partial \varepsilon}{\partial \beta} \quad (24)$$

herleiten. – Es resultieren die Ausdrücke

$$\varepsilon = -\frac{y^W}{\beta} \left[\tanh y^W + \beta v(0) \tanh(\frac{1}{2} y^W) \cdot \sum_{\nu=1}^5 \frac{G_\nu}{(1 + \tanh^2 h(\frac{1}{2} y^W))^\nu} \right] + \frac{v(0)}{2} \tanh^2 h y^W$$

$$- \sum_{\lambda=2}^7 \frac{d\hat{G}_\lambda}{d\beta} \left[\frac{1}{(1 + \tanh^2 h(\frac{1}{2} y^W))^{\lambda-1}} - \frac{1}{2^{\lambda-1}} \right], \quad (25)$$

$$C_u = -k\beta^2 \left\{ \left[-\frac{1}{\beta} \left(y^W \frac{\partial M_1}{\partial y^W} + M_1 \right) + \frac{v(0) \tanh y^W}{\cos^2 h y^W} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda=2}^7 \frac{d\hat{G}_\lambda}{d\beta} \frac{(\lambda-1) \tanh(\frac{1}{2} y^W)}{\cos^2 h(\frac{1}{2} y^W) (1 + \tanh^2(\frac{1}{2} y^W))^\lambda} \right] \right. \\ \left. \cdot \frac{y^W}{\beta (1 - \beta v(0) / \cos^2 h y^W)} + \frac{y^W M_1}{\beta^2} - \sum_{\lambda=2}^7 d^2 \hat{G}_\lambda / d\beta^2 \left[1 / (1 + \tanh^2 h(\frac{1}{2} y^W))^\lambda - \frac{1}{2^{2\lambda-1}} \right] \right\}. \quad (26)$$

M_1 in (26) ist dabei die Magnetisierung nach Formel (15). C_u aus (26) vereinfacht sich für den Spezialfall verschwindender Magnetfeldstärke im überkritischen Bereich auf

$$\frac{C_u}{k} = \beta^2 \sum_{\lambda=2}^7 \frac{d^2 \hat{G}_\lambda}{d\beta^2} \left(1 - \frac{1}{2^{2\lambda-1}} \right) = \frac{(\beta v(0))^2}{12}. \quad (27)$$

Dieser Verlauf von C_u deutet eine Nahordnung an. Eine eingehendere analytische Diskussion von (25) und (26) zeigt, daß ε und C_u folgenden Verlauf haben:

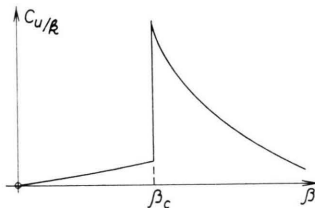


Abb. 2. Atomwärme C_u für $H=0$ als Funktion von $\beta=1/kT$ in der Kettenapproximation.

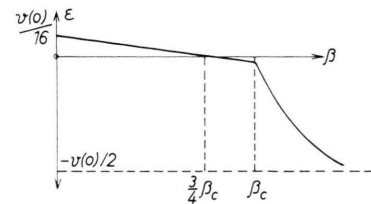


Abb. 3. Innere Energie ε für $H=0$ als Funktion von β in der Kettenapproximation.

Aus (26) kann man erkennen, was auch in Abb. 2 sichtbar gemacht ist, daß die Atomwärme (26) mit den empirischen Befunden noch besser übereinstimmt als das WEISSsche Modell. Leider wird der Verlauf der inneren Energie im überkritischen Gebiet nicht ganz richtig wiedergegeben.

β	$M_1(0)$
0,02	0,0
0,06	0,0
0,10	0,0
0,14	0,0
0,18	0,0
0,22	0,5029
0,26	0,7520
0,30	0,8585
0,34	0,9249
0,38	0,9515

Tab. 1. Spontane Magnetisierung in der Kettenapproximation nach Formel (15) mit $v(0)=5$.

Mit einer elektronischen Rechenmaschine wurden nun die Magnetisierung, die freie Energie (20) und die Druck-Dichte Isothermen des ISING-Modells (23) numerisch ausgerechnet. Die Ergebnisse sind in Tab. 1 und in Abb. 4 bis Abb. 6 wiedergegeben.

Der kritische Punkt liegt wie beim WEISSschen Modell an der Stelle

$$\beta_c = 0,2.$$

Die in diesem Abschnitt aufgeführten numerischen Ergebnisse lassen sich mit denen von ⁴ vergleichen. In ⁴ ergab sich für $v(0)$ der Wert $v(0) = 1/2 \gamma = 5$ mit $\gamma = 0,1$ wie er in obenstehenden Rechnungen verwendet wurde.

Vom Verlauf der spontanen Magnetisierung und von der Lage des kritischen Punktes her gesehen, scheinen die Ergebnisse von ⁴, vor allem die auf Grund von (46)⁴ und (51)⁴ errechneten Werte besser mit der Erfahrung übereinzustimmen als diejenigen der Kettenapproximation.

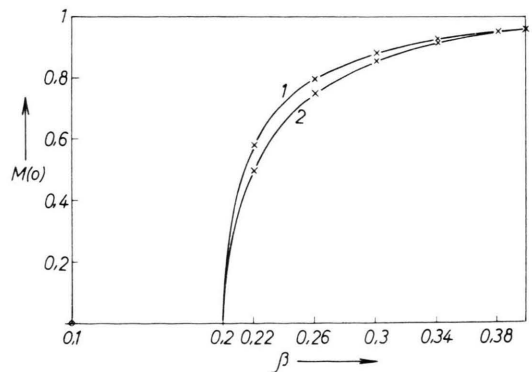


Abb. 4. Spontane Magnetisierung als Funktion von β mit $v(0)=5$; 1 = Kettenapproximation (15), 2 = WEISSches Modell.

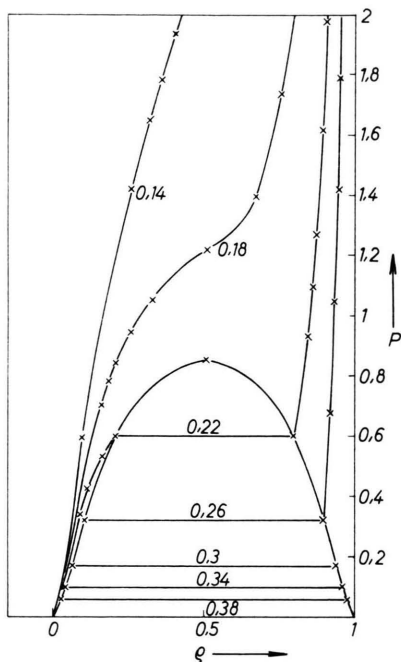


Abb. 5. Druck-Dichte ($p-\rho$)-Isothermen des Gittergases in der Kettenapproximation mit $v(0) = 5$.

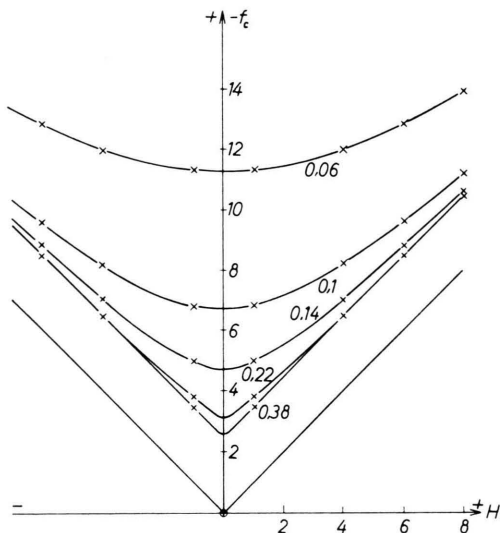


Abb. 6. Freie Energie des ISING-Modells in der Kettenapproximation mit $v(0) = 5$.

Die Wassermelonenapproximation

Aus den Kettendiagrammen (Abb. 1), deren Summation T_{ij}^{11} ergab, und einfachen βv_{ij} -Bindungen kann man durch beliebige Parallelschaltung Leitern aufbauen. Abb. 7 zeigt solch ein Leiterdiagramm.

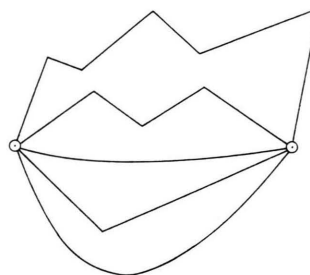


Abb. 7. Leiterdiagramm (Wassermelone) aus drei Ketten und zwei einfachen Bindungen.

Die Summe aller Leiterdiagramme mit n Sprossen liefert zu G_{ij}^{nn} den Beitrag

$$(\beta v_{ij} + T_{ij}^{11})^n / n! .$$

Ersetzt man G_{ij}^{nn} näherungsweise allein durch diesen Beitrag, so erhält man wegen (1) für die magnetische Suszeptibilität in der Wassermelonenapproximation

$$\chi = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i+j=1}^v [\beta v_{ij} + T_{ij}^{11}]^n (M_{n+1})^2 / n! + M_2 . \quad (28)$$

In (28) kann man nicht mehr auf die Berechnung von $T_{ij}^{11}(0)$ ausweichen, sondern man ist auf die Auswertung von T_{ij}^{11} angewiesen. Betrachtet man das dreidimensionale Problem, so hat man in T_{ij}^{11} Summationen über ein sehr großes (theoretisch unendliches) räumliches Punktgitter auszuführen.

Nähert man wie in ⁴ diese diskreten Summationen durch Integrationen über unendlich große dreidimensionale Bereiche an, so erhält man nach Einführung von Zweizentrenkoordinaten und FOURIER-Transformierten ⁹ für T_{ij}^{11} das eindimensionale Integral

$$T_{ij}^{11} = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{t^2 M_2 [\beta \overline{v}(t)]^2}{1 - (2\pi)^{3/2} M_2 \beta v(t)} \cdot \frac{\sin(r_{ij} t)}{r_{ij} t} dt \quad (29)$$

mit den FOURIER-Transformierten

$$r_{ij} v_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} t \overline{v}(t) \sin(r_{ij} t) dt, \quad \overline{v}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} r_{ij} v_{ij} \sin(r_{ij} t) dr_{ij}, \quad (30)$$

wobei r_{ij} der Abstand zwischen den Gitterpunkten ($i j$) ist.

Mit dem speziellen Potential

$$v_{ij} = \exp[-\gamma r_{ij}]/r_{ij}$$

kann man die Integrale (29) und (30) geschlossen auswerten.

Für (30) ergibt sich

$$\overline{v}(t) = \frac{2}{\sqrt{2\pi(t^2+\gamma^2)}} \quad (31)$$

Damit folgt aus (29)

$$T_{ij}^{11} = \frac{4M_2\beta^2}{r} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{t \sin(r_{ij}t)}{(t^2+\alpha^2)(t^2+\gamma^2)} dt \quad (32)$$

mit $\alpha^2 = \gamma^2 - 4\pi M_2\beta$. Unter der Voraussetzung $\alpha^2 > 0$ läßt sich (32) mit Hilfe des Residuensatzes ausrechnen. Man erhält

$$T_{ij}^{11} = \frac{\beta}{r} (\exp[-\alpha r] - \exp[-\gamma r]). \quad (33)$$

Ferner ist

$$v(0) = 4\pi \int_0^r r^2 \exp[-\gamma r] dr = 4\pi/\gamma^2. \quad (34)$$

Neben der Bestimmung von T_{ij}^{11} ist die Berechnung der Semiinvarianten M_{n+1} in (28), die zu den beiden Fixvertexen (i, j) gehören, noch ein weiteres Problem. — Es sollen auch 4 in (28) für M_{n+1} die Ansätze der Form

$$M_{n+1} = C_{n+1}(\beta) M_{n+1}^0(y^W)$$

benutzt werden.

M_{n+1}^0 läßt sich aber nicht für beliebig hohe Werte des Laufindex n aus der Differentiationsformel 4

$$M_{n+1}^0 = \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} [\ln(2 \cosh x)]$$

bestimmen. — Eine eingehende analytische Betrachtung der ersten zehn $M_n^0(x)$ auf der Grundlage von obenstehender Formel zeigt nun, daß folgende Ausdrücke für die $M_{n+1}(x)$ in (28) sinnvolle Näherungs-

formeln abgeben:

$$\begin{aligned} M_{2l} &= C \frac{\cos[\pi(l-1)(1+\tanh y^W)]}{\cos^{2h} y^W}, \\ M_{2l+1} &= C \frac{\sin[\pi(l+(l-\frac{1}{2})\tanh y^W)]}{\cos^{2h} y^W}. \end{aligned} \quad (35)$$

Hierbei ist

$$y^W = \frac{4\pi\beta}{\gamma^2} M_1^W + x$$

mit M_1^W als Lösung der Magnetisierungsgleichung des WEISSschen Modells

$$M_1^W = \tanh \left[\frac{4\pi}{\gamma^2} \beta M_1^W + x \right].$$

C ist ein noch frei verfügbarer Parameter.

Setzt man (33) und (35) in (28) ein, macht man ferner für die Semiinvarianten in T_{ij}^{11} den Ansatz

$$M_2(x) = M_2^0(y^W)$$

und setzt man die separat stehende Semiinvariante M_2 in (28) null, nähert man weiterhin die diskrete Summation $\sum_{i \neq j=1}^V$ ebenso wie bei der Berechnung von T_{ij}^{11} durch eine unendliche dreidimensionale Integration an, so gewinnt man nach Einführung von Polarkoordinaten für die magnetische Suszeptibilität χ die Formel

$$\begin{aligned} \chi(x) = \frac{4\pi C^2}{\cos^{2h} y^W} \int_a^\infty dr \cdot r^2 \left\{ \sum_{l=1}^{\infty} \sin^2[\pi(l+(l-\frac{1}{2})\tanh y^W)] \left(\frac{\beta}{r} \exp[-\alpha r] \right)^{2l} \right. \\ \left. + \cos^2[\pi(l-1)(1+\tanh y^W)] \left(\frac{\beta}{r} \exp[-\alpha r] \right)^{2l-1} \right\} \end{aligned} \quad (36)$$

(a ist der mittlere Abstand zweier Gitterpunkte), (36) wurde numerisch auf einer elektronischen Rechenmaschine bearbeitet.

Die Magnetisierung M_1 wurde nach (11) durch die Integration

$$M_1 = \int_0^H \chi(x) dx + C_{\text{int}}$$

mit χ aus (36) ebenfalls numerisch bestimmt. Die Parameter C und C_{int} wurden dabei durch die Randbedingungen

$$\begin{aligned} M_1(H) &= -M_1(-H), \\ M_1(\pm\infty) &= \pm 1 \end{aligned}$$

festgelegt. — Die Resultate dieser Rechnungen sind in Tab. 2 sowie in Abb. 8 und Abb. 9 aufgeführt.

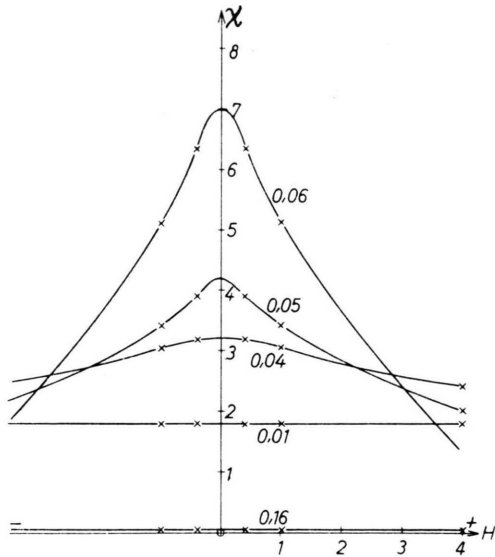


Abb. 8. Magnetische Suszeptibilität des dreidimensionalen ISING-Modells nach Formel (36) mit dem Potential $v_{ij} = \exp[-\gamma r_{ij}]/r_{ij}$ ($\gamma=1$) als Funktion von H .

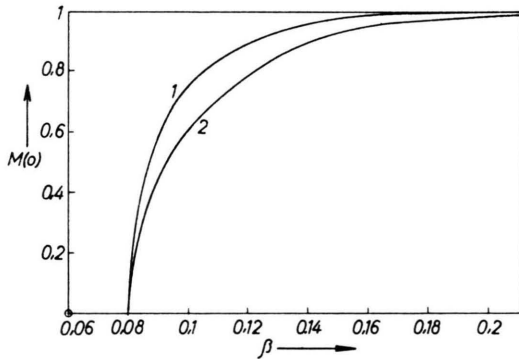


Abb. 9. Spontane Magnetisierung des dreidimensionalen ISING-Modells mit dem Potential $v_{ij} = \exp[-\gamma r_{ij}]/r_{ij}$ ($\gamma=1$); 1 = Wassermelonenapproximation, 2 = WEISSsches Modell.

β	$M_1(0)$	$\chi(0)$
0,01	0,0	1,825
0,04	0,0	3,163
0,05	0,0	4,180
0,06	0,0	7,000
0,16	0,9924	0,034

Tab. 2. Magnetisierung und magnetische Suszeptibilität für verschwindende Magnetfeldstärke H des dreidimensionalen ISING-Modells mit dem Potential $v_{ij} = \exp[-\gamma r_{ij}]/r_{ij}$ in der Wassermelonenapproximation mit $a=0,1$ und $\gamma=1$.

Der kritische Punkt der Wassermelonenapproximation stimmt wieder mit dem des WEISSschen Modells überein, denn wegen (35) und (36) ist die Wassermelonenapproximation im Grunde ein modifiziertes WEISSsches Modell. Es ergibt sich

$$\beta_c = 1/4 \pi .$$

Von der Wassermelonenapproximation ist daher ebenso wie von der Kettenapproximation nicht eine solche Verbesserung des WEISSschen Modells in der Umgebung des kritischen Punktes zu erwarten wie von den Näherungsansätzen in 4.

Dies wird auch durch den Vergleich der spontanen Magnetisierung von Wassermelonenapproximation und WEISSschem Modell in Abb. 8 bekräftigt.

Die numerischen Rechnungen wurden auf der Datenverarbeitungsanlage vom System IBM 7090 des Deutschen Rechenzentrums in Darmstadt und auf dem Elektronenrechner Zuse Z 23 des Instituts für Physikalische Chemie der Universität Frankfurt am Main durchgeführt.

H. P. NEUMANN dankt der Deutschen Forschungsgemeinschaft für das ihm gewährte Stipendium und seinem verehrten Lehrer, Herrn Professor Dr. HARTMANN, recht herzlich für die äußerst wertvolle Betreuung und Unterstützung während seiner Promotionszeit.