Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Moderne Theoretische Physik IIIb (Theorie Fb) **Sommersemester 2019**

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Dr. Stefan Rex

Blatt 1
Besprechung: 03.05.2019

---

1. Maxwell-Konstruktion: $(10 + 10 + 10 + 5 = 35$ Punkte)

Betrachten Sie ein Van-der-Waals-Gas mit der Zustandsgleichung

$$\left(P + \frac{N^2 a}{V^2}\right)(V - Nb) = Nk_B T. \tag{1}$$

(a) Ausgehend von Gl. (1) berechnen Sie die innere Energie U des Gases. Die Teilchenzahl N sei konstant. Nehmen Sie an, dass $Na/(k_B TV) \ll 1$ und $Nb/V \ll 1$.

(b) Skizzieren Sie die Isothermen $P = P(V)$ eines durch Gl. (1) definierten Van-der-Waals-Gases. Zeigen Sie, dass man die Helmholtzsche Freie Energie $F(V)$ für konstante Temperatur durch ein Integral über $P(V)$ erhält, und skizzieren Sie $F(V)$. Identifizieren Sie Bereiche, in denen $F(V)$ nicht konvex ist (d.h. die isotherme Kompressibilität negativ ist).

Maxwell-Konstruktion: In diesen Bereichen bezeichnet Gl. (1) thermodynamisch instabile Zustände, und die wahre Zustandsgleichung muss in diesen Bereichen modifiziert werden. Die Bereiche rechts und links der nicht-konvexen Bereiche werden als zwei verschiedene Phasen des Materials interpretiert, einer Gasphase und einer Flüssigkeitsphase. Um eine physikalisch sinnvolle freie Energie zu erhalten, ersetzt man den Verlauf der Isothermen im konkaven Bereich durch eine Kurve, die der Koexistenz der beiden Phasen bei den Volumina V_A und V_B entspricht. Bei der Maxwell-Konstuktion bestimmt man die Kurve $P = P_A$ und die Endpunkte V_A und V_B im (P-V)-Diagramm so, dass die jeweiligen Flächen zwischen der Van-der-Waals-Isothermen und der wahren Isothermen im Koexistenzbereich oberhalb und unterhalb von $P = P_A$ gleich sind. Die Maxwell-Konstruktion lässt sich ganz allgemein aus den Bedingungen für thermodynamische Stabilität der Koexistenz zweier Phasen A und B ableiten. Wegen des möglichen Austauschs von Teilchen zwischen den beiden Phasen muss $\mu_A = \mu_B$ gelten. Mechanische Stabilität erfordert $P_A = P_B$.

(c) Leiten Sie aus der Bedingung thermodynamischer Stabilität den Verlauf der wahren Isothermen im (F-V)-Diagramm und im (P-V)-Diagramm ab. Zeigen Sie, dass sich die Lage der Endpunkte V_A und V_B des Koexistensbereichs von Gas und Flüssigkeit im (P-V)-Diagramm aus der Bedingung

$$\int_{V_A}^{V_B} P\, dV = P_A(V_B - V_A) \tag{2}$$

ergibt.

(d) Bei einer kritischen Temperatur T_c reduziert sich der Koexistenzbereich auf einen Punkt $P_c(V_c)$ im (P-V)-Diagramm. Bestimmen Sie T_c, V_c und P_c in Abhängigkeit von a, b und N.

2. Thermodynamik von nichtwechselwirkenden Spins: $(10 + 15 + 5 = 30$ Punkte$)$

Bevor wir uns in der nächsten Aufgabe mit wechselwirkenden Spins befassen, betrachten wir hier zur Wiederholung ein System von $N \gg 1$ Spins $s = 1/2$ ohne Wechselwirkung, welches im Magnetfeld B durch den folgenden Hamilton-Operator beschrieben wird:

$$\hat{H} = -\frac{g\mu_B B}{2} \sum_i \sigma_i^z. \tag{3}$$

(a) Betrachten Sie das mikrokanonische Ensemble für das Spin-System (3). Bestimmen Sie die erlaubten Werte für die Gesamtenergie: $E_{\text{min}} \leq E \leq E_{\text{max}}$. Berechnen Sie die Zahl Ω_E der Zustände, die die gegebene Energie E haben.

(b) Ausgehend von der Entropie $S(E) = k_B \ln(\Omega_E)$ finden Sie die Temperatur $T(E)$ des Systems in Abhängigkeit von der Gesamtenergie E. Beachten Sie, dass das System groß ist, $N \gg 1$, und nehmen Sie an, dass die Energie E nicht zu nahe an den Grenzen des Spektrums liegt ($E - E_{\text{min}} \gg g\mu_B B$ und $E_{\text{max}} - E \gg g\mu_B B$). Welche exotische Eigenschaft des Spin-Systems erhalten Sie für $E > 0$? Welche Eigenschaft des Energiespektrums erlaubt es?

(c) Betrachten Sie nun zwei Spin-Systeme ($N \gg 1$ Spins in jedem), die die Gesamtenergien $E_1 > 0$ bzw. $E_2 < 0$ besitzen. Nachdem die Systeme in thermischen Kontakt gebracht werden relaxieren sie ins Gleichgewicht. Berechnen Sie die Temperatur des Gesamtsystems am Ende der Thermalisierung.

(d) **20 Bonuspunkte**

Betrachten Sie nun das kanonische Ensemble für das Spin-System (3). Das Spin-System sei über einen Wärmeleiter mit einer Probe mit konstanter Wärmekapazität c_V^{Probe} verbunden. Zu Beginn hat die Probe die Temperatur T_1 und das Spin-System die Temperatur T_2. Finden Sie die Temperatur T_*, die das Spin-System und die Probe nach dem Temperaturausgleich besitzen für die beiden Fälle: (i) $k_B T_1 > k_B T_2 \gg g\mu_B B$ und (ii) $g\mu_B B \gg k_B T_1 > k_B T_2$ unter der Annahme, dass $k_B N / c_V^{\text{Probe}} < 1$.

3. Kleiner Ising-Ring: $(5 + 15 + 15 = 35$ Punkte$)$

In dieser Aufgabe betrachten wir drei ($N = 3$) Ising-Spins. Der erste Spin s_1 und der letzte Spin s_N seien verbunden, so dass die Spins ringförmig angeordnet sind. Der Hamilton-Operator des Modells im Magnetfeld B lautet

$$\hat{H} = -J\left(s_1^z s_2^z + s_2^z s_3^z + s_3^z s_1^z\right) - \gamma B \sum_{i=1}^{3} s_i^z, \tag{4}$$

wobei J die Austauschwechselwirkung ist und $s_i^z = \pm 1/2$.

(a) Wie sehen die Mikrozustände des Systems aus? Bestimmen Sie die zugehörigen Energien.

(b) Ausgehend vom allgemeinen Ausdruck für die Zustandssumme bestimmen Sie für $B = 0$ die freie Energie $F(T)$, die Entropie S und die Wärmekapazität c_B.

(c) Berechnen Sie nun die Magnetisierung M und die magnetische Suszeptibilität χ im Limes $\gamma B \ll k_B T$.