

## Moderne Theoretische Physik IIIb 2019

Prof. Dr. Alexander Mirlin  
PD Dr. Igor Gornyi, Dr. Stefan RexLösungen zu 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

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

- (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-Konstruktion 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 Koexistenzbereichs von Gas und Flüssigkeit im  $(P-V)$ -Diagramm aus der Bedingung

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

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  $N$ .

### Lösung:

- (a) Da wir die Teilchenzahl  $N$  als konstanten Parameter auffassen, ist das totale Differential der inneren Energie  $U$  mit unabhängigen Variablen  $T$  und  $V$  durch

$$\begin{aligned}dU(T, V) &= TdS(T, V) - P(T, V)dV \\ &= T \frac{\partial S(T, V)}{\partial T} dT + \left[ T \frac{\partial S(T, V)}{\partial V} - P(T, V) \right] dV \\ &= C_V(T, V)dT + \left[ T \frac{\partial P(T, V)}{\partial T} - P(T, V) \right] dV\end{aligned}$$

gegeben. Die im letzten Schritt verwendete Maxwell-Relation folgt dabei aus dem Differential der freien Energie. Aus Gleichung (1) erhalten wir

$$P(T, V) = \frac{Nk_B T}{V} \left[ \frac{1}{1 - Nb/V} - \frac{Na}{k_B T V} \right]$$

und damit

$$T \frac{\partial P(T, V)}{\partial T} - P(T, V) = \frac{N^2 a}{V^2}.$$

Die Vertauschbarkeit der zweiten Ableitungen von  $U$  liefert zudem

$$\frac{\partial C_V(T, V)}{\partial V} = \frac{\partial}{\partial T} \left[ T \frac{\partial P(T, V)}{\partial T} - P(T, V) \right] = \frac{\partial}{\partial T} \frac{N^2 a}{V^2} = 0,$$

die Wärmekapazität ist also vom Volumen unabhängig und kann als  $C_V(T)$  geschrieben werden. Somit ergibt sich

$$dU(T, V) = C_V(T)dT + \frac{N^2 a}{V^2} dV$$

und schließlich

$$U(T, V) = U(T_0, V_0) + \int_{T_0}^T C_V(\theta) d\theta + N^2 a \left( \frac{1}{V_0} - \frac{1}{V} \right).$$

In der angegebenen Näherung für kleines  $a$  und  $b$  wissen wir, dass  $C_V$  nicht von der Temperatur abhängt (wie im idealen Gas), also

$$U(T, V) = U(T_0, V_0) + C_V(T - T_0) + N^2 a \left( \frac{1}{V_0} - \frac{1}{V} \right).$$

Die Berechnung der Wärmekapazität ist in dieser Aufgabe nicht verlangt, da die Zustandsgleichung (1) dafür nicht ausreicht. Die Wärmekapazität ergibt sich zum Beispiel aus der genäherten kanonischen Zustandssumme

$$Z(T, V) = \frac{V^N}{N! \lambda^{3N}(T)} \left[ 1 + \frac{N^2 a}{k_B T V} - \frac{N^2 b}{V} \right]$$

mit der thermischen Wellenlänge  $\lambda(T) = \sqrt{2\pi\hbar^2/mk_B T}$ . Es gilt

$$\begin{aligned} C_V(T) &= -T \frac{\partial^2}{\partial T^2} k_B T \ln(Z(T, V)) \\ &= \frac{3}{2} N k_B T \frac{\partial^2}{\partial T^2} T \ln(T) + N k_B \mathcal{O}\left(\frac{Na}{k_B T V}, \frac{Nb}{V}\right) \\ &= \frac{3}{2} N k_B + N k_B \mathcal{O}\left(\frac{Na}{k_B T V}, \frac{Nb}{V}\right). \end{aligned}$$

In der in dieser Aufgabe betrachteten Näherung können die zusätzlichen Terme vernachlässigt werden und wir erhalten die temperaturunabhängige Wärmekapazität des idealen Gases. Die innere Energie kann daher als

$$U(T, V) = U(T_0, V_0) + \frac{3}{2} N k_B (T - T_0) + N^2 a \left( \frac{1}{V_0} - \frac{1}{V} \right)$$

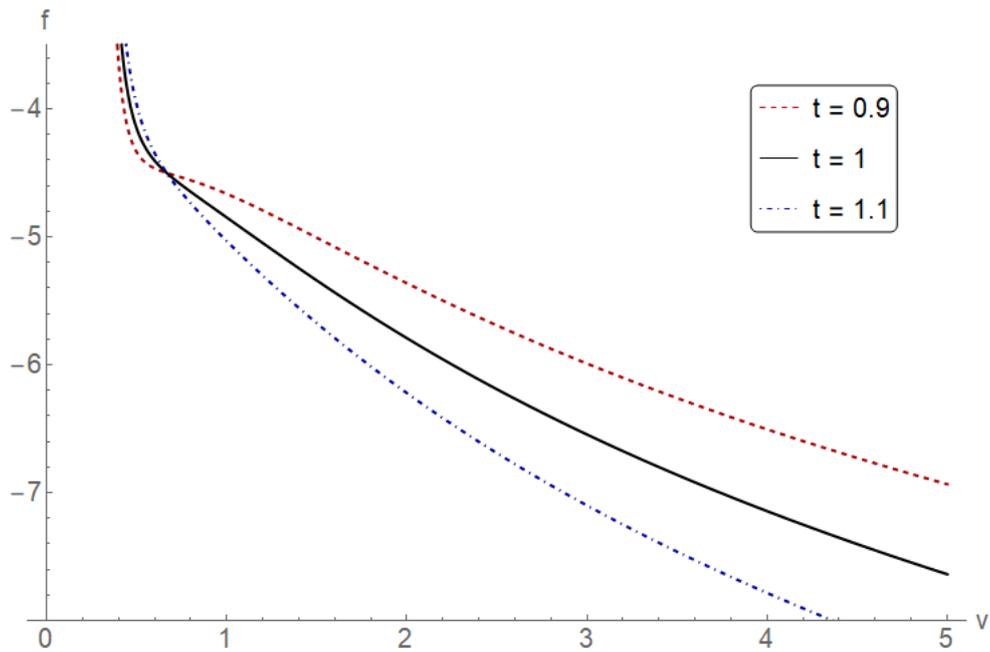
geschrieben werden. Der im Vergleich zum idealen Gas zusätzliche Beitrag stammt von der Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Er wird mit steigender Teilchendichte relevanter.

- (b) Verschiedene Isothermen des Van-der-Waals-Gases sind in Abbildung 1 dargestellt. Dabei werden die reduzierten Größen  $p = P/P_c$ ,  $v = V/V_c$  und  $t = T/T_c$  verwendet (vgl. Teil (d)).

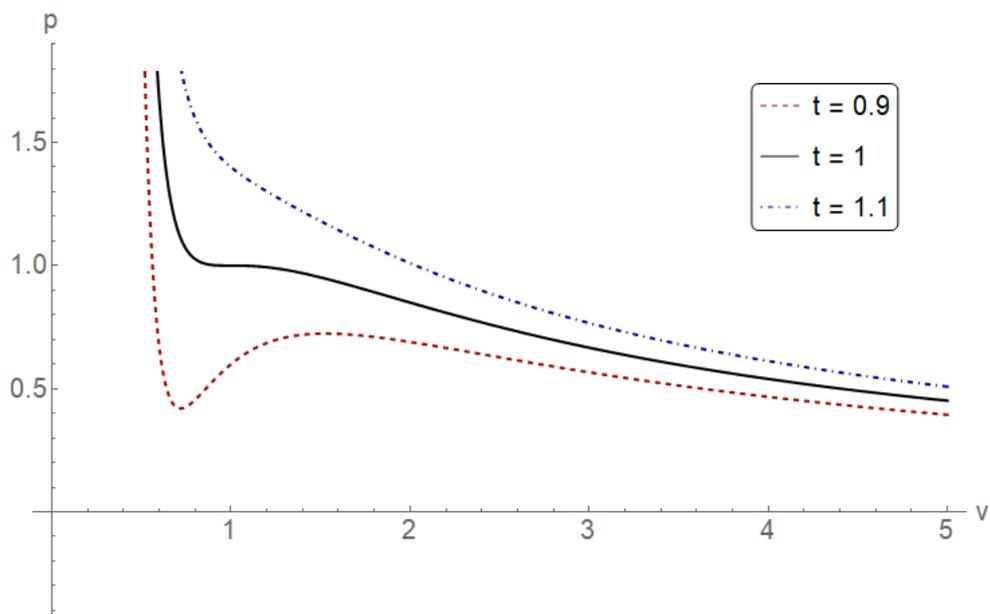
Für  $T < T_c$  gibt es einen Bereich  $(V_1(T), V_2(T))$ , in dem der Druck mit abnehmendem Volumen steigt. Dieses unphysikalische Verhalten zeigt sich auch bei der freien Energie. Auf einer Isothermen gilt  $dF(T, V) = -P(T, V) dV$ , also

$$\begin{aligned} F(T, V) &= F(T, V_0) - \int_{V_0}^V P(T, \tilde{V}) d\tilde{V} \\ &= F(T, V_0) - N k_B T \left[ \ln\left(\frac{V - Nb}{V_0 - Nb}\right) + \frac{Na}{k_B T} \left( \frac{1}{V} - \frac{1}{V_0} \right) \right]. \end{aligned}$$

In Abbildung 2 ist zu erkennen, dass die freie Energie (im Diagramm ist  $f = F/P_c V_c$  gezeigt) für  $T < T_c$  im Intervall  $(V_1(T), V_2(T))$  konkav ist. Das widerspricht der in der Vorlesung hergeleiteten Stabilitätsbedingung. Dieses Problem wird im Folgenden durch die in der Aufgabe beschriebene Maxwell-Konstruktion gelöst, indem die Van-der-Waals-Isotherme im problematischen Bereich durch eine geeignete Koexistenzkurve zweier Phasen A (flüssig) und B (gasförmig) ersetzt wird.



**Abbildung 2:** Die freie Energie auf Isothermen des Van-der-Waals-Gases bei  $t = 0,9$ ,  $t = 1$  und  $t = 1,1$ .



**Abbildung 1:** Isothermen des Van-der-Waals-Gases im  $p$ - $v$ -Diagramm bei  $t = 0,9$ ,  $t = 1$  und  $t = 1,1$ .

- (c) Wir gehen also davon aus, dass es zwei Volumina  $V_A(T) \leq V_1(T)$  und  $V_B(T) \geq V_2(T)$  gibt, zwischen denen zwei Phasen im Gleichgewicht vorliegen. Bei  $V_B(T)$  befindet sich das komplette System im gasförmigen Zustand. Bei weiterer isothermer Kompression findet dann der Phasenübergang statt, bis schließlich beim kleineren Volumen  $V_A(T)$  ausschließlich der flüssige Zustand vorliegt. Dazwischen werden Volumen und Teilchenzahl zwischen den beiden Phasen ausgetauscht. Die in der Vorlesung hergeleiteten Gleichgewichtsbedingungen lauten

$$P_{\text{liq}}(T, V) = P_{\text{gas}}(T, V) =: P_{\text{vap}}(T, V)$$

und

$$\mu_{\text{liq}}(P_{\text{vap}}(T, V), T) = \mu_{\text{gas}}(P_{\text{vap}}(T, V), T)$$

für  $V_A(T) \leq V \leq V_B(T)$  (die Temperatur ist ohnehin im ganzen System konstant). Zu beachten ist hierbei, dass das chemische Potential  $\mu(T, P, N) = G(T, P, N)/N$  als Funktion der Variablen  $T, P$  und  $N$  nicht von  $N$  abhängen kann, da es eine intensive Größe ist. An den Endpunkten  $V_A(T)$  und  $V_B(T)$  der Koexistenzkurve stimmen die chemischen Potentiale überein. Da  $\mu_{\text{liq}}$  und  $\mu_{\text{gas}}$  verschiedene Funktionen sind, kann die geforderte Gleichheit nur dann auch überall dazwischen gelten, wenn  $P_{\text{vap}}(T, V)$  nicht vom Volumen abhängt. Wir schreiben daher  $P_{\text{vap}}(T)$  für diesen sogenannten Sättigungsdampfdruck.

Zwischen  $V_A(T)$  und  $V_B(T)$  ist die korrekte Isotherme im  $P$ - $V$ -Diagramm somit die konstante Funktion  $P_{\text{vap}}(T)$ . Folglich ist die freie Energie in diesem Bereich eine Gerade mit Steigung  $-P_{\text{vap}}(T)$  und es muss

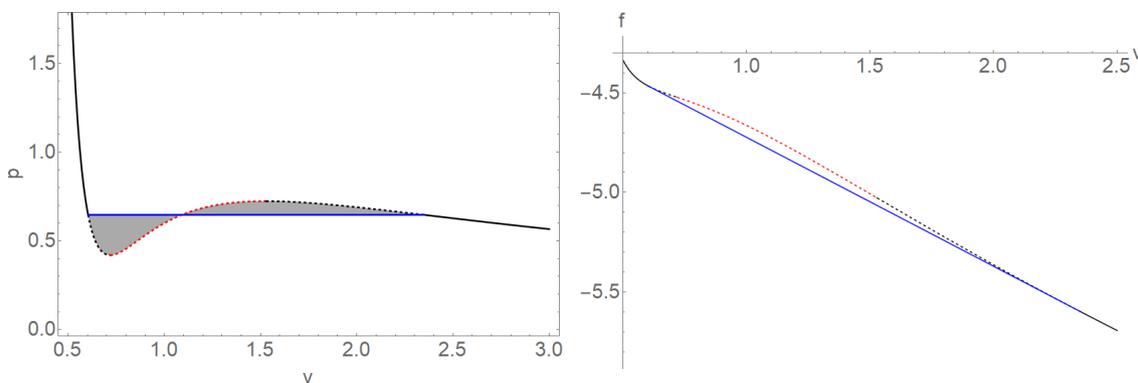
$$-P_{\text{vap}}(T) = \frac{F(T, V_B(T)) - F(T, V_A(T))}{V_B(T) - V_A(T)} \stackrel{(b)}{=} -\frac{1}{V_B(T) - V_A(T)} \int_{V_A(T)}^{V_B(T)} P(T, V) dV$$

gelten. Äquivalent dazu ist die auf dem Aufgabenblatt angegebene Bedingung

$$\int_{V_A(T)}^{V_B(T)} P(T, V) dV = P_{\text{vap}}(T)(V_B(T) - V_A(T)),$$

die zusammen mit  $P_{\text{vap}}(T) = P(T, V_A(T)) = P(T, V_B(T))$  die drei unbekanntenen Größen  $V_A(T)$ ,  $V_B(T)$  und  $P_{\text{vap}}(T)$  eindeutig bestimmt. Die Maxwell-Konstruktion ist in Abbildung 3 dargestellt. Obige Bedingung bedeutet gerade, dass die zwei schattierten Flächen gleich groß sein müssen.

- (d) Mit steigender Temperatur wird der Koexistenzbereich immer kleiner, bis er schließlich bei der kritischen Temperatur  $T_c$  nur noch aus dem kritischen Punkt  $(V_c, P_c)$  besteht. Der unphysikalische Bereich schrumpft gemäß  $V_1(T_c) = V_2(T_c)$  ebenfalls auf diesen Punkt zusammen und die Funktion  $V \mapsto P(T_c, V)$  hat anstelle von Ma-



**Abbildung 3:** Die Maxwell-Konstruktion bei  $t = 0,9$  im  $p$ - $v$ - und im  $f$ - $v$ -Diagramm. Der rote Teil der Van-der-Waals-Isotherme entspricht dem unphysikalischen Bereich und die blaue Linie ist die Maxwell'sche Korrektur.

ximum und Minimum dort nur noch einen Sattelpunkt. Es folgt

$$0 = \left. \frac{\partial P(T_c, V)}{\partial V} \right|_{V=V_c} = -Nk_B T_c \left[ \frac{1}{(V_c - Nb)^2} - \frac{2Na}{k_B T_c V_c^3} \right],$$

$$0 = \left. \frac{\partial^2 P(T_c, V)}{\partial V^2} \right|_{V=V_c} = 2Nk_B T_c \left[ \frac{1}{(V_c - Nb)^3} - \frac{3Na}{k_B T_c V_c^4} \right].$$

Auflösen dieser Gleichungen ergibt  $V_c = 3Nb$ , also

$$k_B T_c = \frac{2Na(V_c - Nb)^2}{V_c^3} = \frac{8a}{27b}$$

und schließlich

$$P_c = Nk_B T_c \left[ \frac{1}{V_c - Nb} - \frac{Na}{k_B T_c V_c^2} \right] = \frac{a}{27b^2}.$$

Insbesondere ist der sogenannte kritische Kompressibilitätsfaktor

$$\frac{P_c V_c}{Nk_B T_c} = \frac{3}{8}$$

unabhängig von  $a$  und  $b$ , also vom betrachteten Gas.

## 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:

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

- (a) Betrachten Sie das mikrokanonische Ensemble für das Spin-System (3). Bestimmen Sie die erlaubten Werte für die Gesamtenergie:  $E_{\min} \leq E \leq E_{\max}$ . Berechnen Sie die Zahl  $\Omega_E$  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 ( $E - E_{\min} \gg g\mu_B B$  und  $E_{\max} - E \gg g\mu_B B$ ). 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  $c_V^{\text{Probe}}$  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 Temperatúrausgleich 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  $k_B N / c_V^{\text{Probe}} < 1$ .

## Lösung:

(a) Die Eigenzustände des Hamilton-Operators

$$\hat{H} = -\frac{g\mu_B B}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z =: -\varepsilon_0 \sum_{i=1}^N \sigma_i^z$$

können durch die Anzahl  $n \in \{0, \dots, N\}$  der negativ orientierten Spins charakterisiert werden. Der zugehörige Energieeigenwert ist dann

$$E_n = n\varepsilon_0 + (N - n)(-\varepsilon_0) = (2n - N)\varepsilon_0, \quad n \in \{0, \dots, N\}.$$

Insbesondere ist  $E_{\min} = E_0 = -N\varepsilon_0$  und  $E_{\max} = E_N = N\varepsilon_0$ . Jedes dieser Energieniveaus ist  $\binom{N}{n}$ -fach entartet, es gilt also

$$\Omega_{E_n} = \binom{N}{n} = \binom{N}{\frac{1}{2} \left( N + \frac{E_n}{\varepsilon_0} \right)}, \quad n \in \{0, \dots, N\}.$$

Für  $N \gg 1$  ist der Abstand benachbarter Energieniveaus im Vergleich zur Breite des Spektrums klein (Verhältnis  $1/N$ ). Wir fassen die möglichen Energien daher als Kontinuum auf und schreiben

$$\Omega_E = \binom{N}{\frac{1}{2} \left( N + \frac{E}{\varepsilon_0} \right)} = \frac{N!}{\Gamma \left[ \frac{1}{2} \left( N + \frac{E}{\varepsilon_0} \right) + 1 \right] \Gamma \left[ \frac{1}{2} \left( N - \frac{E}{\varepsilon_0} \right) + 1 \right]}$$

für  $E_{\min} \leq E \leq E_{\max}$ .

(b) Ist  $E_{\min} \ll E \ll E_{\max}$ , so sind die Argumente aller Gamma-Funktionen/Fakultäten in  $\Omega_E$  groß und wir können die Stirling-Formel  $\ln(k!) \sim k[\ln(k) - 1]$  verwenden, um

$$\frac{S(E)}{k_B} = \ln(\Omega_E) \simeq N \ln(N) - \frac{N\varepsilon_0 + E}{2\varepsilon_0} \ln \left[ \frac{N\varepsilon_0 + E}{2\varepsilon_0} \right] - \frac{N\varepsilon_0 - E}{2\varepsilon_0} \ln \left[ \frac{N\varepsilon_0 - E}{2\varepsilon_0} \right]$$

zu erhalten. Für die Temperatur ergibt sich

$$T(E) = \left( \frac{\partial S(E)}{\partial E} \right)^{-1} = \frac{2\varepsilon_0}{k_B \ln \left( \frac{N\varepsilon_0 - E}{N\varepsilon_0 + E} \right)} = -\frac{\varepsilon_0}{k_B \operatorname{artanh} \left( \frac{E}{N\varepsilon_0} \right)},$$

für  $E > 0$  ist sie also negativ! Dieses Phänomen hängt damit zusammen, dass im betrachteten System für höhere (positive) Energien weniger anstatt (wie etwa beim idealen Gas) mehr Zustände zur Verfügung stehen. Physikalisch ist die Ursache die Beschränktheit des (Einteilchen-)Energiespektrums, wodurch es nur wenige Möglichkeiten gibt, eine hohe Energie (nahe  $N\varepsilon_0$ ) auf die  $N$  Spins zu verteilen.

Invertieren der obigen Beziehung liefert (jetzt mit  $T$  als unabhängiger Variable)

$$E(T) = -N\varepsilon_0 \tanh \left( \frac{\varepsilon_0}{k_B T} \right).$$

Ordnen wir deshalb die Temperaturen von kalt (niedrige Energie) nach warm (hohe Energie), so gilt für alle  $T \in (0, \infty)$

$$E(0^+) < E(T) < E(\infty) = E(-\infty) < E(-T) < E(0^-).$$

Die negativen Temperaturen sind in diesem Sinne demzufolge insbesondere „heißer“ als die unendliche Temperatur.

- (c) Werden zwei derartige Systeme mit Energien  $E_1 > 0$  und  $E_2 < 0$  in thermischen Kontakt gebracht, so ist die Temperatur  $T$  nach adiabatischer Relaxation ins Gleichgewicht durch die Energieerhaltung  $E_1 + E_2 = E(T)|_{N \rightarrow 2N}$  bestimmt. Mit Teil (b) folgt

$$T = -\frac{\varepsilon_0}{k_B \operatorname{artanh}\left(\frac{E_1 + E_2}{2N\varepsilon_0}\right)}.$$

Im Spezialfall  $E_2 = -E_1$  ist  $T = \pm\infty$ .

- (d) Die kanonische Zustandssumme für einen Spin ist

$$Z_1(T) = \sum_{\sigma^z \in \{-1, 1\}} e^{-\beta T(-\varepsilon_0 \sigma^z)} = 2 \cosh(\beta T \varepsilon_0)$$

und für  $N$  nichtwechselwirkende Spins gilt  $Z_N = Z_1^N$ . Damit ist die innere Energie des Spinsystems im kanonischen Ensemble (in Übereinstimmung mit dem mikrokanonischen Resultat aus Teil (b)) durch

$$U(T) = -\frac{\partial}{\partial \beta T} \ln(Z_N(T)) = -N\varepsilon_0 \tanh(\beta T \varepsilon_0)$$

gegeben. Beim Temperatúrausgleich mit der Probe (ohne Verluste, konstantes Probenvolumen) bleibt die Gesamtenergie gleich, es gilt also

$$c_V^{\text{Probe}}(T_* - T_1) = -(U(T_*) - U(T_2)) = N\varepsilon_0(\tanh(\beta_{T_*} \varepsilon_0) - \tanh(\beta_{T_2} \varepsilon_0)).$$

Wir unterscheiden nun zwei Fälle:

- (i)  $\varepsilon_0 \ll k_B T_2 < k_B T_1$ :

Hier setzen wir

$$\alpha = \frac{N\varepsilon_0^2}{k_B T_2 c_V^{\text{Probe}} T_1} < \frac{\varepsilon_0^2}{k_B T_2 k_B T_1} \ll 1.$$

Mit  $\tanh(x) \simeq x$  für  $0 < x \ll 1$  folgt

$$T_*^2 - (1 - \alpha)T_1 T_* - \alpha T_1 T_2 \simeq 0$$

oder

$$T_* \simeq \frac{T_1}{2}(1 - \alpha) \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{4\alpha T_2}{(1 - \alpha)^2 T_1}} \right] \simeq T_1 - \alpha(T_1 - T_2)$$

unter Vernachlässigung höherer Ordnungen in  $\alpha$ .

- (ii)  $\varepsilon_0 \gg k_B T_1 > k_B T_2$ :

Für  $x \gg 1$  ist  $\tanh(x) \simeq 1 - 2e^{-2x}$ . Es folgt

$$\begin{aligned} T_* &= T_1 - \frac{2N\varepsilon_0}{c_V^{\text{Probe}}} \left[ e^{-2\beta_{T_*} \varepsilon_0} - e^{-2\beta_{T_2} \varepsilon_0} \right] \\ &\simeq T_1 - \frac{2N\varepsilon_0}{c_V^{\text{Probe}}} \left[ e^{-2\beta_{T_1} \varepsilon_0} - e^{-2\beta_{T_2} \varepsilon_0} \right], \end{aligned}$$

da der zweite Term auf der rechten Seite gegenüber dem ersten exponentiell klein ist.

### 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

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

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

- Wie sehen die Mikrozustände des Systems aus? Bestimmen Sie die zugehörigen Energien.
- Ausgehend vom allgemeinen Ausdruck für die Zustandssumme bestimmen Sie für  $B = 0$  die freie Energie  $F(T)$ , die Entropie  $S$  und die Wärmekapazität  $c_B$ .
- Berechnen Sie nun die Magnetisierung  $M$  und die magnetische Suszeptibilität  $\chi$  im Limes  $\gamma B \ll k_B T$ .

#### Lösung:

- Die acht Mikrozustände des Systems sind durch  $(s_1^z, s_2^z, s_3^z) \in \{-1/2, 1/2\}^3$  festgelegt. Die Energien erhält man durch Einsetzen in den bereits diagonalen Hamilton-Operator. Es gilt

$$\begin{aligned} E_{+++} &= -\frac{3}{4}J - \frac{3}{2}\gamma B, \\ E_{++-} &= E_{+-+} = E_{-++} = \frac{1}{4}J - \frac{1}{2}\gamma B, \\ E_{+--} &= E_{-+-} = E_{-+-} = \frac{1}{4}J + \frac{1}{2}\gamma B, \\ E_{---} &= -\frac{3}{4}J + \frac{3}{2}\gamma B. \end{aligned}$$

- Die Zustandssumme ist durch

$$\begin{aligned} Z(T, B) &= \exp \left[ \beta_T \left( \frac{3}{4}J + \frac{3}{2}\gamma B \right) \right] + 3 \exp \left[ \beta_T \left( -\frac{1}{4}J + \frac{1}{2}\gamma B \right) \right] \\ &\quad + 3 \exp \left[ \beta_T \left( -\frac{1}{4}J - \frac{1}{2}\gamma B \right) \right] + \exp \left[ \beta_T \left( \frac{3}{4}J - \frac{3}{2}\gamma B \right) \right] \\ &= 2 \exp \left( \frac{3}{4}\beta_T J \right) \cosh \left( \frac{3}{2}\beta_T \gamma B \right) + 6 \exp \left( -\frac{1}{4}\beta_T J \right) \cosh \left( \frac{1}{2}\beta_T \gamma B \right) \end{aligned}$$

gegeben. Damit ergibt sich für die freie Energie ohne Magnetfeld

$$F(T, 0) = -k_B T \ln(Z(T, 0)) = -k_B T \ln \left( 2e^{\frac{3}{4}\beta_T J} + 6e^{-\frac{1}{4}\beta_T J} \right).$$

Aus ihr erhalten wir Entropie und Wärmekapazität bei konstantem Feld gemäß

$$\begin{aligned} S(T, 0) &= -\frac{\partial F(T, 0)}{\partial T} = k_B \ln \left( 2e^{\frac{3}{4}\beta_T J} + 6e^{-\frac{1}{4}\beta_T J} \right) - \frac{3J}{4T} \frac{e^{\beta_T J} - 1}{e^{\beta_T J} + 3} \\ &= k_B \left[ \ln(2) + \ln(1 + 3e^{-\beta_T J}) + \frac{3\beta_T J}{3 + e^{\beta_T J}} \right] \end{aligned}$$

und

$$c_B(T, 0) = T \frac{\partial S(T, 0)}{\partial T} = k_B \frac{3(\beta_T J)^2 e^{\beta_T J}}{(3 + e^{\beta_T J})^2}.$$

(c) Für  $\beta_T \gamma B \ll 1$  gilt

$$\begin{aligned} F(T, B) &= F(T, 0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F(T, B)}{\partial B^2} \Big|_{B=0} B^2 + k_B T \mathcal{O}((\beta_T \gamma B)^4) \\ &= -k_B T \left[ \ln \left( 2e^{\frac{3}{4}\beta_T J} + 6e^{-\frac{1}{4}\beta_T J} \right) + \frac{3}{8} \frac{1 + 3e^{\beta_T J}}{3 + e^{\beta_T J}} (\beta_T \gamma B)^2 + \mathcal{O}((\beta_T \gamma B)^4) \right]. \end{aligned}$$

Magnetisierung und Suszeptibilität sind damit

$$\begin{aligned} M(T, B) &= -\frac{\partial F(T, B)}{\partial B} = \frac{3}{4} \frac{1 + 3e^{\beta_T J}}{3 + e^{\beta_T J}} \beta_T \gamma^2 B + \mathcal{O}((\beta_T \gamma B)^3), \\ \chi(T, B) &= \frac{\partial M(T, B)}{\partial B} = \frac{3}{4} \frac{1 + 3e^{\beta_T J}}{3 + e^{\beta_T J}} \beta_T \gamma^2 + \mathcal{O}((\beta_T \gamma B)^2). \end{aligned}$$