

**Moderne Theoretische Physik III (Einführung in die Theorie der  
Kondensierten Materie) SS 2024**

Prof. Dr. A. D. Mirlin

Blatt 2, Abgabe bis 13.05.2024

Dr. Risto Ojajärvi and Dr. Paul Pöpperl

Besprechung 17.05.2024

**1. Parameter des Landau-Funktional für den magnetischen Übergang des Heisenberg-Modells in Molekularfeldnäherung**

(6 + 6 + 8 + 10 + 10 = 40 Punkte)

Auf dem vorangegangenen Übungsblatt haben wir die kanonische Zustandssumme des Heisenberg-Modells in Molekularfeldnäherung hergeleitet:

$$Z_{\text{mf}} = \exp(-\beta E_0) \left( \frac{\sinh(\beta B_{\text{eff}}(2S + 1)/2)}{\sinh(\beta B_{\text{eff}}/2)} \right)^N \quad (1)$$

$$B_{\text{eff}} := 2sJz \quad (2)$$

$$E_0 = s^2 JzN \quad (3)$$

$$s := \langle S_z \rangle \quad (4)$$

Wir haben gesehen, dass sich aus der Selbstkonsistenzgleichung für den Spin-Erwartungswert im isotropen Fall (alle Spin-Erwartungswerte gleich) eine kritische Temperatur ergibt, unterhalb derer Lösungen mit  $\langle S_z \rangle > 0$  möglich sind, die überhalb nicht existieren. Beim Unterschreiten der kritischen Temperatur kann also ein Phasenübergang von einer Phase mit ungeordneten Spins in eine geordnete Phase stattfinden.

In der Vorlesung haben Sie die Landau-Theorie kennengelernt, mit der man Phasenübergänge mit wenigen phänomenologischen Parametern beschreibt, ohne die zugrundeliegende mikroskopische Theorie zu kennen.

In dieser Aufgabe wollen wir uns die Landau-theoretische Beschreibung des Übergangs überlegen (Teilaufgaben (a) und (b)), und dann die mikroskopische Theorie nutzen, um die phänomenologischen Parameter, die in diese Beschreibung eingehen, herzuleiten (Teilaufgaben (c) und (d)). In Aufgabe (e) vergleichen wir das mikroskopische Ergebnis mit der Landau-Theorie in der Nähe des Phasenüberganges.

- Welche Eigenschaften muss ein Ordnungsparameter in der Landau-Theorie erfüllen? Und warum? Geben Sie einen Ordnungsparameter für den Phasenübergang aus der Aufgabenstellung an und begründen Sie, warum dieser geeignet ist.
- Schreiben Sie das Landau-Funktional für den betrachteten Phasenübergang in Abwesenheit eines externen Feldes auf und begründen Sie.
- In der Vorlesung haben Sie gelernt, dass die Zustandssumme mit Hilfe des Landau-Funktional  $\mathcal{F}$  als

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp(-\beta \mathcal{F}[\phi]) \quad (5)$$

geschrieben wird, wobei  $\mathcal{D}\phi$  ein Funktionalintegral über alle möglichen Konfigurationen des Ordnungsparameters  $\phi(\mathbf{r})$  ist. Nehmen Sie an, dass die physikalische Realisierung des Ordnungsparameters am Phasenübergang ortsunabhängig ist, und nutzen Sie die Sattelpunktsnäherung, um einen Zusammenhang zwischen der freien Energie und dem Landau-Funktional herzuleiten.

- (d) Da wir für den Phasenübergang aus der Aufgabenstellung eine mikroskopische Theorie (in Molekularfeldnäherung) lösen können, können wir die Parameter des Funktionals in dieser Näherung mit Hilfe der Relation aus der letzten Teilaufgabe herleiten. Bestimmen Sie die Parameter des Landau-Funktional in den gegebenen Näherungen.
- (e) Zeigen Sie, dass die Temperaturabhängigkeit des Landau-Funktional nahe des Übergangs analog zur Vorlesung ist. *Hinweis: Entwickeln Sie die Koeffizienten für  $T \approx T_c$ .*

## 2. Landau-Theorie mit $\varphi^3$ -Term (10 + 5 + 15 = 30 Punkte)

Betrachten Sie eine Landau-Theorie mit dem folgenden Freie-Energie-Funktional  $f$ :

$$f[\varphi] = \frac{1}{2}(\nabla\varphi)^2 + \frac{t}{2}\varphi^2 - \frac{b}{3}\varphi^3 + \frac{c}{4}\varphi^4, \quad (6)$$

mit  $t = a(T - T^*)$  und  $a, b, c > 0$ . Wie in der Vorlesungen besprochen, sind solche  $\varphi^3$ -Termen nicht erlaubt für das Ising- oder Heisenberg-Modell, aufgrund von Symmetrie. In Systemen in denen diese Symmetrie explizit gebrochen ist, z.B. in manchen Flüssigkristallen, muss man jedoch ungerade Terme betrachten.

- (a) Berechnen Sie die Minima  $\varphi_{\min}$  von  $f[\varphi]$  in Abhängigkeit der Parameter. Finden Sie in jedem Fall heraus, welche Minima lokal / global sind. Fertigen Sie Skizzen von  $f[\varphi]$  für die unterschiedlichen Fälle an und beschreiben Sie jeweils ob eine geordnete oder ungeordnete Phase vorliegt.
- (b) Für welches  $T = T_c$  wird die geordnete Phase instabil?
- (c) Bestimmen Sie die Entropie  $S$  in der Nähe von  $T_c$ . Betrachten Sie insbesondere die Fälle  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} S(T = T_c \pm \epsilon)$ . Was ist die Ordnung des Phasenübergangs?

## 3. Allgemeine Gasgleichung aus Prinzipien der Statistischen Physik (Wiederholungsaufgabe zu Mod. Theo. II)

(5+5+5+5+5+5=30 Punkte)

In dieser Übung leiten wir die allgemeine Gasgleichung  $PV = nRT$  eines idealen Gases her. Der Ausgangspunkt ist die (klassische) Hamilton-Funktion  $H$  eines Gases mit  $N$  Teilchen in einem Potentialtopf mit Volumen  $V$  und totaler Energie  $E = H(\{\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N\})$ , welche nicht miteinander wechselwirken:

$$H(\{\vec{p}_i\}, \{\vec{q}_i\}) := H(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N; \vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{(\vec{p}_i)^2}{2m} + \mathcal{V}(\{q_i\}), \quad (7)$$

mit der Masse eines Teilchens  $m$  und Impulsen  $\vec{p}_i$  und Orten  $\vec{q}_i$ . Das Potential  $\mathcal{V}(\{q_i\})$  ist ausserhalb eines Volumens  $V$  unendlich und innerhalb des Volumens 0. (Unendlich hoher Potentialtopf).

*Hinweis:* Zur Lösung dieser Aufgabe sind  $d$ -dimensionale Kugelkoordinaten hilfreich:

$$x_1 = r \cos \varphi_1 \quad (8)$$

$$x_2 = r \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \quad (9)$$

$$\vdots \quad (10)$$

$$x_{d-1} = r \sin \varphi_1 \dots \sin \varphi_{d-2} \cos \varphi_{d-1} \quad (11)$$

$$x_d = r \sin \varphi_1 \dots \sin \varphi_{d-2} \sin \varphi_{d-1} \quad (12)$$

Dabei ist  $r^2 = \sum_{i=1}^d x_i^2$  und  $\varphi_i$  sind Winkelvariablen. Die Funktionaldeterminante bei Transformation von kartesischen Koordinaten zu Kugelkoordinaten hat die Form  $r^{n-1} F(\varphi_1, \dots, \varphi_{d-1})$ . Es gilt

$$F_d := \int d\varphi_1 \dots \int d\varphi_{d-1} F(\varphi_1, \dots, \varphi_{d-1}) = 2\pi^{d/2} / \Gamma(d/2) \quad (13)$$

wobei  $\Gamma(n) = (n-1)!$  die Gammafunktion ist.

- (a) Welche Ensemble benutzen wir hier?  
 (b) Zeigen Sie, dass das für das Gas zur Verfügung stehende Phasenraumvolumen  $\Omega(E, V, N)$  gegeben ist durch:

$$\Omega(E, V, N) = \frac{1}{N! (2\pi\hbar)^{3N}} \frac{V^N (2\pi m E)^{3N/2}}{\Gamma(3N/2 + 1)}. \quad (14)$$

- (c) Bestimmen Sie die Entropie  $S$  im Limit dass  $N, V$  groß sind. Die "Zahl" von Zuständen mit Energie in einem schmalen Fenster der Breite  $\Delta E$  ist  $\mathcal{N}(E, V, N) := \frac{\partial \Omega(E, V, N)}{\partial E} \Delta E$ , und für die Entropie gilt:

$$S(E, V, N) := k_B \ln \left( \mathcal{N}(E, V, N) \right) \quad (15)$$

$$\rightarrow k_B \ln \left( \Omega(E, V, N) \right) \quad (16)$$

mit der Boltzmann-Konstanten  $k_B$ . Die letzte Gleichheit gilt für große Teilchenzahlen (siehe Skript).

*Hinweis:* benutzen Sie die Stirling-Formel.

- (d) Anhand dieser Aufgabe, geben Sie eine physikalische Interpretation der Entropie  $S(E, V, N)$  an. Erklären Sie auch, wofür der Faktor  $1/N!$  in  $\Omega$  gut war. Anhand Ihrer Interpretation, welches Verhalten der Entropie erwarten Sie bei verschwindender Energie,  $E \rightarrow 0$  (hier und im Allgemeinen)? Stimmt Ihre Erwartung mit dem Ergebnis  $S(E \rightarrow 0)$  überein (falls Sie die vorangegangene Aufgabe nicht gelöst haben, können Sie  $S(E, V, N)$  auch nachschlagen)? Warum (nicht)?  
 (e) Bestimmen Sie  $U(S, V, N)$  aus dem Ergebnis von Teil (c). Bestimmen Sie dann  $T(S, V, N)$  und  $P(S, V, N)$ . Finden Sie daraus die Entropie  $S(T, V, N)$ . Leiten Sie die ideale Gasgleichung her, indem Sie  $P(T, V, N)$  durch Einsetzen ermitteln.  
 (f) Bestimmen Sie die innere Energie als Funktion von Temperatur, Volumen und Teilchenzahl, indem Sie  $S(T, V, N)$  in  $U(S, V, N)$  einsetzen.