Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie
der Kondensierten Materie

Übungen zu Moderne Theoretischen Physik III SS 16

Prof. Dr. A. Shnirman

PD Dr. B. Narozhny, Dr. P. Schad

Blatt 13

Besprechung: Freitag, 15.07.2016

---

1. Molekularfeldtheorie des Ising-Modells (30 Punkte, schriftlich)

Betrachten Sie ein Ising-Modell aus N Spins ($\sigma_i = \pm 1$) mit Magnetfeld H und unendlicher Reichweite der Wechselwirkung ($J > 0$):

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N}\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j - H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{1}$$

Die Summe im ersten Term läuft über *alle* Spinpaare. Die Molekularfeldtheorie funktioniert hier völlig analog zum in der Vorlesung besprochenen Heisenberg-Modell.

(a) Benutzen Sie die Transformation (Nachprüfen!)

$$e^{\frac{J\beta}{2N}\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j} = e^{\frac{J\beta}{2N}\left(\sum_i\sigma_i\right)^2} = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}}\int dh e^{-\frac{\beta N h^2}{2J}+\beta h\sum_i\sigma_i} \tag{2}$$

um die Summen über $\sigma_i = \pm 1$ in der Zustandssumme auszuführen.
Hinweis: Das Ergebnis hat die Form

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi J}}\int dh\exp[-\beta\mathcal{G}(H,T,h)]\ . \tag{3}$$

(b) Analysieren Sie den Integranden bzw. den Exponenten $\mathcal{G}(H,T,h)$. Finden Sie eine Gleichung für den Wert $h_0(H,T)$ von h, bei dem der Integrand maximal wird. Vergleichen Sie mit der Selbstkonsistenzgleichung der Molekularfeldtheorie des Heisenberg-Modells aus der Vorlesung, was ist das effektive Feld H_{eff}?

(c) Im thermodynamischen Limes $N \gg 1$ kommt der dominante Beitrag zum Integral aus der Region um $h \approx h_0$. Warum? Ersetzen Sie $h = h_0 + \delta h$, entwickeln Sie $\mathcal{G}$ bis zur Ordnung $(\delta h)^2$ und führen Sie die Integration über δh aus (*Hinweis:* Verwenden Sie die Gleichung für h_0 um H zu eliminieren).

(d) Berechnen Sie die freie Enthalpie $G(H,T) = -k_BT\ln Z$ und zeigen Sie, dass für $h_0 \ll J$

$$\frac{G(H,T)}{N} \approx \frac{k_B(T_c - T)}{2}m^2 + bm^4 - k_BT\log 2\ , \tag{4}$$

wobei $m(H,T) = \frac{h_0(H,T)}{J}$ die Magnetisierung ist. Was ist hier T_c und b?

2. Cluster-Entwicklung des 2D-Ising-Modells (20 Punkte, schriftlich)

Betrachten Sie ein 2D-Ising-Modell aus $N \gg 1$ Spins ohne äußeres Magnetfeld auf einem Quadratgitter (Koordinationszahl $z = 4$) mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \; . \tag{5}$$

(a) Bringen Sie die Zustandssumme auf die Form

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^P \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} \left[1 + \sigma_i \sigma_j \tanh \frac{J}{k_B T} \right] \; . \tag{6}$$

P ist hier die Zahl der Nächste-Nachbar-Paare, für $N \gg 1$ ist bis auf Randeffekte $P = \frac{zN}{2}$.

(b) Überlegen Sie sich, dass man Z wie folgt entwickeln kann:

$$\begin{aligned} Z = \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^P \sum_{\{\sigma\}} \Bigg[& 1 + \tanh \frac{J}{k_B T} \left(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \dots \right) \\ & + \tanh^2 \frac{J}{k_B T} \left(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_3 + \dots \right) + \tanh^3 \frac{J}{k_B T} \left(\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_2 \sigma_4 + \dots \right) + \dots \Bigg] \; . \end{aligned} \tag{7}$$

Das ist die sogenannte Cluster-Entwicklung des Ising-Modells. Welche Terme in (7) tragen zu Z bei? Zeigen Sie, dass

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{k_B T} \right)^P \sum_{\{\sigma\}} \left[1 + C_4 \tanh^4 \frac{J}{k_B T} + C_6 \tanh^6 \frac{J}{k_B T} + \dots \right] \; , \tag{8}$$

wobei C_n die Zahl der geschlossenen n-Spin-Cluster ist.

(c) Betrachten Sie den Grenzfall hoher Temperaturen $k_B T \gg J$ und berechnen Sie die Wärmekapazität bis zur vierten Ordnung in $\frac{J}{k_B T}$.

3. Van-der-Waals-Gas und Maxwellkonstruktion (50 Punkte, mündlich)

In der Vorlesung haben Sie die Van-der-Waals-Gleichung kennengelernt, die im Gegensatz zur Zustandsgleichung des idealen Gases Wechselwirkungen zwischen den Teilchen berücksichtigt:

$$\left(P + \frac{N^2 a}{V^2} \right) (V - Nb) = N k_B T \; . \tag{9}$$

Der Kohäsionsdruck a und wird durch eine schwache langreichweitige Anziehung zwischen den Atomen generiert und reduziert P im Vergleich zum idealen Gas. Das endliche Volumen der Atome selbst („hard-core“-Abstoßung) wird durch das Kovolumen b berücksichtigt. Die Größen a und b sind materialspezifisch und werden als Van-der-Waals-Konstanten bezeichnet.

(a) Skizzieren Sie die Isothermen $P = P(V)$ eines durch Gl. (9) definierten Van-der-Waals-Gases. (Die Teilchenzahl sei konstant.) Zeigen Sie, dass man die Helmholtzsche Freie Energie $F(V)$ für konstante Temperatur durch ein Integral über $P(V)$ erhält, und skizzieren Sie $F(V)$ anhand der Skizze für $P(V)$ (schematisch, durch graphische „Integration“) in einem weiteren Diagramm. Identifizieren Sie Bereiche, in denen $F(V)$ nicht konvex ist.

In diesen Bereichen bezeichnet Gl. (9) 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, die konvex als Funktion von V ist, 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.

(b) Leiten Sie aus der Bedingung mechanischer Stabilität ($P_A = P_B$) für diesen Fall den Verlauf der 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

$$\int_{V_A}^{V_B} P \, dV = P_A(V_B - V_A) \tag{10}$$

ergibt. Gl. (10) entspricht der Maxwellkonstruktion. Bei der Maxwellkonstuktion 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 $P = P_A$ ein bestimmtes Verhältnis haben. Welches?

(c) Die Maxwell-Konstruktion lässt sich auch 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 $P_A = P_B$. Benutzen Sie diese Bedingungen und die Gibbs-Duhem-Relation, um Gl. (10) herzuleiten.

(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 als Funktion von a, b und N.

Mit ,,schriftlich” gekennzeichnete Aufgaben sind handschriftlich zu bearbeiten und bis Mittwoch (vor der Besprechung), 10 Uhr, in den dafür vorgesehenen Kasten einzuwerfen.