Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) SS 17

Prof. Dr. Alexander Mirlin
PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier

Blatt 10
Besprechung: 30.06.2017

---

1. Mikrokanonisches Ensemble für Spin $s = 1/2$: $(4 + 10 + 3 = 17$ Punkte)

Betrachten Sie ein System von $N \gg 1$ nichtwechselwirkenden Spins $s = 1/2$, welches im Magnetfeld B durch den folgenden Hamiltonoperator beschrieben wird:

$$\hat{H} = -\frac{g\mu_B B}{2} \sum_i \sigma_i^z. \tag{1}$$

In dieser Aufgabe betrachten wir das mikrokanonische Ensemble für das Spin-System.

(a) 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.

2. Spin-System mit beliebigem Spin s: (8+6+4=18 Punkte)

Betrachten Sie ein System aus N nichtwechselwirkenden Spins $s \geq 1$ in einem Magnetfeld B mit der Gesamtenergie

$$E = -g\mu_B\, B \sum_{i=1}^{N} s_{zi}, \qquad s_{zi} = -s,\, -s+1,\, \ldots s. \tag{2}$$

(a) Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme Z, die freie Energie, die Entropie und die Wärmekapazität c_B bei konstantem Magnetfeld für dieses System.

(b) Berechnen Sie die durchschnittliche Magnetisierung M und die magnetische Suszeptibilität bei konstanter Temperatur $\chi_T = (\partial M/\partial B)_T$.

(c) Das Spin-System mit $s = 1$ werde bei einer Magnetfeldstärke $B_1 > 0$ durch Kopplung an ein Wärmebad auf die Temperatur $T_1 > 0$ gebracht und anschließend wärmeisoliert. Nun ändert man das Magnetfeld adiabatisch auf einen neuen Wert $B_2 > 0$. Was gilt für die Temperatur T_2, die das Spin-System nach der Magnetfeldänderung besitzt?

10 Bonuspunkte: Das Spin-System aus Aufgabe 2(c) sei nun über einen Wärmeleiter mit einer Probe mit konstanter Wärmekapazität c_V^{Probe} verbunden, welche zuvor auf die Temperatur T_1 gebracht wurde. Finden Sie die Temperatur T_*, die das Spin-System und die Probe nach dem Temperaturausgleich besitzen für die beiden Fälle: (i) $k_B T_1 > k_B T_2 \gg g\mu_B B_2$ und (ii) $g\mu_B B_2 \gg k_B T_1 > k_B T_2$ unter der Annahme, dass $k_B N / c_V^{\text{Probe}} < 1$.

3. Van-der-Waals-Gas: (8 + 6 + 6 + 5 = 25 Punkte)

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

$$\left(P + \frac{N^2 a}{V^2}\right)(V - Nb) = N k_B T. \tag{3}$$

(a) Ausgehend von Gl. (3) berechnen Sie die innere Energie U des Gases. Die Teilchenzahl N sei konstant. Nehmen Sie an, dass $Na/(k_B T V) \ll 1$ und $Nb/V \ll 1$.

(b) Skizzieren Sie die Isothermen $P = P(V)$ eines durch Gl. (3) 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. (3) 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

$$\int_{V_A}^{V_B} P \, dV = P_A (V_B - V_A) \tag{4}$$

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.