Freie Universität Berlin
Fachbereich Physik

WS 2006/2007
26.01.2007

Statistische Physik - Theorie der Wärme

(PD Dr. M. Falcke)

Übungsblatt 12: Ferromagnet

Aufgabe 1 (6 Punkte)

Ein ferromagnetisches System aus N Spins kann bei tiefen Temperaturen durch die freie Energie

$$F = N\left(\frac{a}{2}m^2 + \frac{b}{4}m^4 - hm\right)$$

modelliert werden. Hierbei ist m die Magnetisierung und h ein externes magnetisches Feld. Bezeichne T_C die kritische Temperatur, dann ist $a(T) = a_0(T - T_C)/T_C$. Des weiteren seien $a_0, b \in \mathbb{R}^+$.

a. Skizzieren Sie $F(m)$ für die drei Fälle $T > T_C$, $T = T_C$ und $T < T_C$ bei $h = 0$.

b. Berechnen Sie $m(T)$ für $h = 0$, indem Sie die freie Energie minimieren.

c. Berechnen Sie die Entropie $S(T)$ und die Wärmekapazität $C_V(T)$ für $h = 0$ und skizieren Sie $C_V(T)$.

d. Berechnen Sie die magnetische Suszeptibilität $\chi = (\partial m/\partial h)_{h=0}$.

e. Diskutieren Sie graphisch die Abhängigkeit der Magnetisierung m vom externen Feld h für die drei Fälle $a < 0$, $a = 0$ und $a > 0$.

Aufgabe 2 (7 Punkte)

In einer Kette aus N Spins mögen nur die direkt benachbarten Spins miteinander wechselwirken. Ein solches System wird durch den Hamiltonoperator

$$H = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1}$$

beschrieben, wobei J_i die platzabhängige Stärke der Wechselwirkung und $s_i = \pm 1$ ist.

a. Berechnen Sie die kanonische Zustandsumme. Beweisen Sie dazu, dass $Z_N = 2\cosh(\beta J_{N-1}) Z_{N-1}$ gilt. Werten Sie die Zustandsumme für konstantes J aus, d.h. $J_l = J_k$ für $l \neq k$.

b. Berechnen Sie die freie Energie f, die Entropie s, die spezifische Wärme c_V und die innere Energie u pro Teilchen im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ für konstantes J.

c. Zeigen Sie, daß der dritte Hauptsatz erfüllt ist.

d. Die Korrelationsfunktion $G(i,n) := \langle s_i s_{i+n}\rangle$ charakterisiert den Zerfall der Spinkorrelation als Funktion des Abstandes n. Berechnen Sie $G(i,n)$ und zeigen Sie dazu zunächst, daß

$$G(i,n) = \frac{1}{Z_N}\left[\prod_{k=i}^{i+n-1} \frac{\partial}{\partial \beta J_k}\right] Z_N \,.$$

e. Werten Sie die Korrelationsfunktion für konstantes J aus und zeigen Sie, daß G exponentiell abfällt, i.e. $G(i,n) = \exp(-n/\xi)$. Hierbei bezeichnet ξ die Korrelationslänge. Berechnen Sie ξ in führender Ordnung für kleine Temperaturen.

Abgabetermin: Mittwoch, 07.02.2007 vor Beginn der Vorlesung.

Lösungen

Aufgabe 1

a. Abbildung 1 stellt die freie Energie für die drei Bereiche $T < T_C$, $T = T_C$ und $T > T_C$ dar. Deutlich erkennbar ist die bistabile Form von F für $T < T_C$.

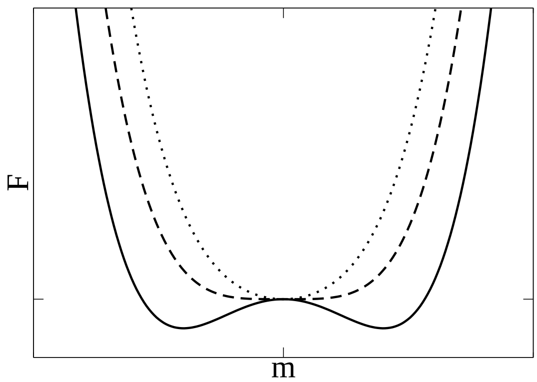

Abbildung 1: Freie Energie F als Funktion der Magnetisierung m bei $h = 0$ für $T < T_C$ (durchgezogen), $T = T_C$ (gestrichelt) und $T > T_C$ (gepunktet).

b. Aus der Minimierung von F folgt die notwendige Bedingung $0 = am + bm^3$. Diese Gleichung besitzt die Lösungen

$$m = 0\,, \qquad m = \pm\sqrt{-\frac{a}{b}} = \pm\sqrt{\frac{a_0}{b}\frac{T_C - T}{T_C}}\,. \tag{1}$$

Gleichung (1) zeigt, daß von Null verschiedene Extrema nur für $T < T_C$ auftreten können. Das Minimum, daß bei $m = 0$ für $T \geq T_C$ existiert, geht in ein lokales Maximum für $T < T_C$ über. Dies ist in Abbildung 2 verdeutlicht.

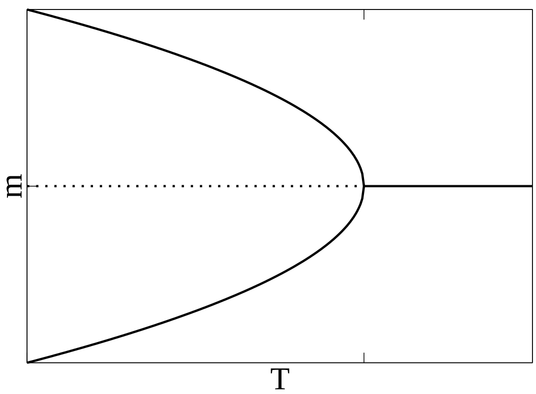

Abbildung 2: Extrema der Magnetisierng m als Funktion der Temperatur bei $h = 0$. Die Minima sind als durchgezogene Linien, das Maximum als gestrichelte Linie gezeichnet.

c. Um F als Funktion der Temperatur zu untersuchen, setzen wir die Lösungen für $m(T)$ aus Gleichung (1) in die Definition von F ein. Da $F \equiv 0$ für $m = 0$, betrachten wir im folgenden nur den Bereich $T < T_C$

$$\frac{F(T)}{N} = \frac{a_0}{2}\frac{T - T_C}{T_C}\frac{a_0}{b}\frac{T_C - T}{T_C} + \frac{b}{4}\frac{a_0^2}{b^2}\left(\frac{T_C - T}{T_C}\right)^2 = -\frac{a_0^2}{4b}\left(\frac{T_C - T}{T_C}\right)^2\,. \tag{2}$$

Daraus ergibt sich die Entropie zu

$$S(T) = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_N = \frac{a_0^2 N}{2b}\frac{T - T_C}{T_C^2} \tag{3}$$

und die Wärmekapazität bei konstantem Volumen zu

$$C_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \frac{a_0^2 N}{2b}\frac{T}{T_C^2}\,. \tag{4}$$

Abbildung 3 stellt die Wärmekapazität als Funktion der Temperatur dar. Da $m = 0$ für $T > T_C$, verschwindet dort auch die Wärmekapazität. Somit springt die Wärmekapazität am kritischen Punkt um $\Delta C_V = a_0^2 N/(2bT_C)$.

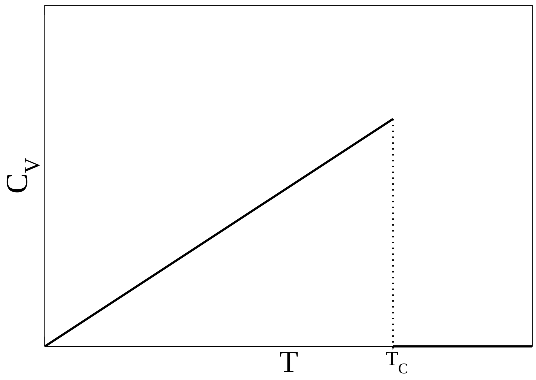

Abbildung 3: Wärmekapazität C_V als Funktion der Temperatur bei $h = 0$.

d. Bei endlichem h folgt aus der Minimierung von F der Zusammenhang $h = ma + bm^3$. Daraus finden wir durch Ableiten nach h für die Suzeptibilität

$$1 = a\chi + 3m^2 b\chi^2 \quad \Leftrightarrow \quad \chi = \frac{1}{a + 3bm^2}\,, \tag{5}$$

so daß

$$\chi = \begin{cases} \frac{T_C}{a_0(T-T_C)}\,, & T > T_C \\ \frac{T_C}{2a_0(T-T_C)}\,, & T < T_C\,. \end{cases} \tag{6}$$

Am kritischen Punkt divergiert die Suszeptibilität.

e. Abbildung 4 zeigt die Magnetisierung bei endlichem äußeren Feld für verschiedene Temperaturbereiche. Die Bedingungen $a < 0$, $a = 0$ und $a > 0$ entsprechen jeweils $T < T_C$, $T = T_C$ und $T > T_C$. Deutlich erkennbar ist, daß für $T < T_C$ in einem endlichen Intervall von h zu einem Wert des äußeren Feldes drei Werte der Magnetisierung existieren. Diese Kurve ist die Grundlage für das Phänomen der Hysterese.

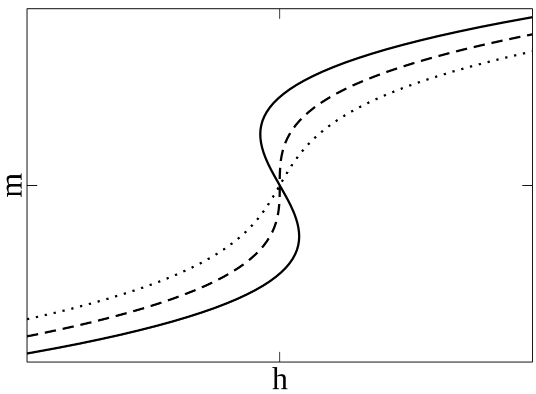

Abbildung 4: Magnetisierung m als Funktion des äußeren Feldes h für $T < T_C$ (durchgezogen), $T = T_C$ (gestrichelt) und $T > T_C$ (gepunktet)

,

Aufgabe 2

a. Aus der Definition der Zustandssumme $Z_N = \mathrm{Sp}\exp(-\beta H)$ folgt

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{s_1=\pm1} \cdots \sum_{s_N=\pm1} \exp\left(\beta \sum_{i=1}^{N-1} J_i s_i s_{i+1}\right) \\ &= \sum_{s_1=\pm1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm1} \sum_{s_N=\pm1} \exp\left(\beta \sum_{i=1}^{N-2} J_i s_i s_{i+1}\right) \exp\left(\beta J_{N-1} s_{N-1} s_N\right) \\ &= \sum_{s_1=\pm1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm1} \exp\left(\beta \sum_{i=1}^{N-2} J_i s_i s_{i+1}\right) 2\cosh\left(\beta J_{N-1} s_{N-1}\right) \\ &= 2\cosh\left(\beta J_{N-1}\right) Z_{N-1}\,, \end{aligned} \tag{7}$$

da $s_{N-1} = \pm 1$ und $\cosh(x) = \cosh(-x)$. Damit erhalten wir

$$Z_N = Z_2 \prod_{k=2}^{N-1} 2\cosh\left(\beta J_k\right)\ . \tag{8}$$

Verwenden wir schließlich

$$Z_2 = \sum_{s_1=\pm1} \sum_{s_2=\pm2} \exp\left(\beta J_1 s_1 s_2\right) = 2 \cdot 2\cosh\left(\beta J_1\right)\ , \tag{9}$$

so ergibt sich die kanonische Zustandssumme zu

$$Z_N = 2 \prod_{k=1}^{N-1} 2\cosh\left(\beta J_k\right) = 2\left[2\cosh\left(\beta J\right)\right]^{N-1}\ , \tag{10}$$

wobei wir in der letzten Umformung $J = \mathrm{const}$ gesetzt haben.

b. Die freie Energie pro Spin lautet

$$f = \frac{F}{N} = -\frac{k_B T}{N}\ln 2 - \frac{k_B T(N-1)}{N}\ln\left[2\cosh\left(\beta J\right)\right] \approx -k_B T \ln\left[2\cosh\left(\beta J\right)\right]\ . \tag{11}$$

Damit erhalten wir für die Entropie pro Spin

$$s = \frac{S}{N} = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_N \approx k_B \ln\left[2\cosh\left(\beta J\right)\right] - \frac{J}{T}\tanh\left(\beta J\right) \tag{12}$$

und für die innere Energie pro Spin

$$u = \frac{U}{N} = -\frac{\partial}{N\partial\beta}\ln Z_N = -J\tanh\left(\beta J\right)\ . \tag{13}$$

Die Wärmekapazität pro Spin folgt schließlich zu

$$c_V = \frac{C_V}{N} = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{J^2}{k_B T^2}\frac{1}{\cosh^2\left(\beta J\right)}\ . \tag{14}$$

Die Näherungen beziehen sich auf den Limes $N \to \infty$.

c. Der dritte Hauptsatz der Thermodynamik besagt, daß die Entropie pro Teilchen im Grenzfall $T \to 0$ verschwindet. Dies ist in der Tat erfüllt, da

$$\lim_{T\to0} s = \lim_{T\to0}\left\{k_B \ln\left[2\cosh\left(\beta J\right)\right] - \frac{J}{T}\tanh\left(\beta J\right)\right\} = 0\,. \tag{15}$$

Für $T \to 0$ gilt $\beta \to \infty$, so daß $2\cosh(\beta J) = \exp(\beta J) + \exp(-\beta J) \approx \exp(\beta J)$. Daher divergiert der erste Term in Gleichung (15) wie

$$\lim_{T \to 0} k_B \ln\left[2\cosh\left(\beta J\right)\right] \approx \frac{J}{T}\,. \tag{16}$$

Auf der anderen Seite ist $\lim_{\beta\to\infty} \tanh(\beta J) = 1$, woraus mit Gleichung (16) die Behauptung (15) folgt.

d. Setzen wir $\tau_i := s_i s_{i+1}$, so gilt wegen $s_i^2 = 1$

$$G(i,n) = \langle s_i s_{i+n}\rangle = \langle s_i s_{i+1} s_{i+1} \cdots s_{i+n-1} s_{i+n-1} s_{i+n}\rangle = \langle \tau_i \cdots \tau_{i+n-1}\rangle\,. \tag{17}$$

Die Zustandssumme lässt sich mit der *Bindungsvariablen* τ als

$$Z_N = 2 \sum_{\tau_1=\pm1} \cdots \sum_{\tau_{N-1}=\pm1} \exp\left(\beta \sum_{i=1}^{N-1} J_i \tau_i\right)\,, \tag{18}$$

schreiben, wobei der Faktor 2 daher kommt, daß die Werte $\tau_i = \pm 1$ für jedes Paar $s_i s_{i+1}$ zweimal angenommen werden. Für die Korrelationsfunktion erhalten wir

$$G(i,n) = \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial \beta J_i} \cdots \frac{\partial}{\partial \beta J_{i+n-1}} Z_N = \frac{1}{Z_N}\left[\prod_{k=i}^{i+n-1} \frac{\partial}{\partial \beta J_k}\right] Z_N = \prod_{k=i}^{i+n-1} \tanh(\beta J_k)\,. \tag{19}$$

e. Werten wir Gleichung (19) für konstantes J aus, so erhalten wir

$$G(i,n) = \tanh^n(\beta J)\,. \tag{20}$$

Damit finden wir für die Korrelationslänge ξ aus dem Ansatz $G(i,n) = \exp(-n/\xi)$

$$\begin{aligned}
\xi^{-1} = -\ln\left[\tanh(\beta J)\right] \quad &= \quad \ln\left[\frac{1+e^{-2\beta J}}{1-e^{-2\beta J}}\right] \\
&\approx \quad \ln\left(1 + 2e^{-2\beta J} + e^{-4\beta J}\right) \approx 2e^{-2\beta J}.
\end{aligned}$$

Hier haben wir in der letzten Zeile die für $|x| \ll 1$ ($\beta \gg 1$) gültigen Approximationen

$$\frac{1}{1-x} \approx 1 + x \qquad \text{und} \qquad \ln(1+x) \approx x$$

benutzt und den Term $e^{-4\beta J}$ vernachlässigt. Die Korrelationslänge

$$\xi = \frac{1}{2} e^{2\beta J} \tag{21}$$

divergiert also in erster Ordnung im Limes $T \to 0$, was auf einen Phasenbergang hindeutet. Einen Phasenbergang bei endlichen Temperaturen liefert erst das 2-dimensionale Ising Modell.