Universität Leipzig
Institut für Theoretische Physik
Prof. Dr. K. Kroy WS 2014/15

Theoretische Physik III
Thermodynamik und statistische Mechanik

---

13. Übungsblatt

Aufgabe 30: *Eindimensionales Ising-Modell* **(5 Punkte)**

Der Hamiltonian des eindimensionalen Ising-Modells für N Spins ($s_i = \pm 1$, $i = 1, \ldots, N$) mit freien Randbedingungen lautet

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

wobei J_i die Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins i und $i+1$ beschreibt.

a) Berechnen Sie die Zustandssumme Z_N,

$$Z_N = \sum_{\{s\}} \mathrm{e}^{-\beta H(\{s\})} = \sum_{s_1} \cdots \sum_{s_N} \mathrm{e}^{-\beta H(\{s\})} \, ,$$

indem Sie eine Rekursionsrelation zwischen Z_N und Z_{N+1} herleiten. Geben Sie Z_N für den üblichen Spezialfall $J_i \equiv J \; \forall i$ an. (2P)

b) Berechnen Sie die Spinkorrelationsfunktion $\langle s_i s_{i+j} \rangle$ und spezialisieren Sie das Ergebnis wieder auf $J_i \equiv J \; \forall i$. (2P)

c) Zeigen Sie, dass die spontane Magnetisierung $M_s = \langle s \rangle$ (für homogene Wechselwirkungen, $J_i \equiv J \; \forall i$) für das unendlich große System nur zwei Werte annehmen kann,

$$M_s(T) = \begin{cases} 0, & T > 0 \\ 1, & T = 0 \end{cases} .$$

Nutzen Sie aus, dass $\langle s_i s_{i+j} \rangle \to \langle s \rangle^2$, für $j \to \infty$, ist. (1P)

Aufgabe 31*: *Mean-Field-Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells* **(5 Zusatzpunkte)**

Die Hamiltonfunktion des Ising-Modells auf einem beliebigen regulären Gitter ist

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \, ,$$

wobei $s_i = \pm 1$ und $J > 0$ (ferromagnetische Kopplung). Die Summe läuft dabei über alle q Paare von Spins, die nächste Nachbarn auf dem Gitter sind. Die Magnetisierung sei definiert als $M = \langle s \rangle$.

a) Geben Sie die Energie des $i$ten Spins in Molekularfeld-Näherung an und berechnen Sie in dieser Näherung die Zustandssumme. (2ZP)

b) Zeigen Sie, dass in der Mean-Field-Näherung die Selbstkonsistenzgleichung

$$M_s = \frac{k_\mathrm{B} T}{qJ} \operatorname{arctanh}(M_s)$$

gilt. Analysieren Sie mit Hilfe dieser Beziehung das kritische Verhalten des Magneten. Bestimmen Sie die kritische Temperatur für ein Quadratgitter und vergleichen Sie diese mit dem exakten Ergebnis von Onsager ($T_c \approx 2.27\,\mathrm{J/k_B}$). (3ZP)

Hinweis: Für $T \approx T_c$ kann $M_s \ll 1$ angenommen werden.

Aufgabe 32: *Phasengrenzflächen* **(6 Punkte)**

a) Berechnen Sie das Ordnungsparameterprofil an einer ebenen Phasengrenze (in der Nähe des kritischen Punktes, also $t = (T - T_\mathrm{c})/T_\mathrm{c} \to 0^{(-)}$) mithilfe der Minimierung des Landau-Ginzburg Funktionals,

$$L = n_\mathrm{c} k_\mathrm{B} T_\mathrm{c} \int_V \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, \mathcal{L}_\mathrm{G}\,, \qquad \text{wobei} \qquad \mathcal{L}_\mathrm{G} = \frac{\ell^2}{2}(\nabla\psi)^2 + \frac{t}{2}\psi^2 + \frac{g}{4}\psi^4\,.$$

Verwenden Sie dabei die Randbedingungen $\psi(z \to \pm\infty) = \pm\sqrt{-t/g}$. (3P)

Hinweis: Das gesuchte Profil minimiert das Landau-Ginzburg Funktional und errechnet sich aus der Euler-Lagrange Gleichung,

$$\frac{\delta L}{\delta \psi} = \nabla \frac{\partial \mathcal{L}_G}{\partial \nabla\psi} - \frac{\partial \mathcal{L}_G}{\partial \psi} = 0\,.$$

Werten Sie obige Gleichung für $\psi = \psi(z)$ aus und integrieren Sie diese, um auf eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung zu kommen.

b) Diskutieren Sie das Ergebnis

$$\psi(z) = \psi_1 \tanh(z/\xi)$$

aus Teilaufgabe a), insbesondere die Form und Rolle der Parameter ψ_1 und ξ. (1P)

c) Berechnen Sie die Grenzflächenspannung, indem Sie den aus $\mathcal{L}_\mathrm{G}$ für die in a) gefundene Lösung resultierenden Grenzflächenbeitrag zur freien Energie L durch die Grenzfläche aufintegrieren. Diskutieren Sie Ihr Ergebnis. (2P)

Hinweis: Zeigen Sie zunächst, dass $\mathcal{L}(\psi) - \mathcal{L}(\psi_1) = \ell^2(\partial_z\psi)^2/2$ gilt, wobei die Landau-Funktion $\mathcal{L}$ durch $\mathcal{L}_\mathrm{G} = \mathcal{L} + \ell^2(\partial_z\psi)^2/2$ definiert ist.

gesamt: 11 + 5 Punkte

Abgabe: **Do. 22.01.**, vor der Vorlesung
Die mit * gekennzeichneten Aufgaben sind Zusatzaufgaben und gehen nicht in die reguläre Wertung ein.