25) Ein Gittergas mit Wechselwirkung

Auf M Plätzen, 1D und periodisch angeordnet (Platz $M+1$ ist Platz 1), können sich je nur kein oder ein Proton aufhalten und zwar nur im dortigen Grundzustand bei ϵ_0. Geraten 2 Protonen direkt nebeneinander, so kommt die Energie ϵ_1 hinzu. Wir denken großkanonisch, lassen jeden Platz separat mit dem Reservoir Kontakt aufnehmen,

(a) geben jedem Platz (dem k–ten) einen Index n_k ($n_k = 0, 1$), können also z.B. $N = \sum_{k=1}^{M} n_k$ aufschreiben und schließlich die Zustandssumme $Z_{\rm gr}(T, M, \mu - \epsilon_0, \epsilon_1)$.

(b) Um dieses Vorgehen zu testen, setzen wir $\epsilon_1 = 0$, bilden Ω, S, N und elminieren $\beta(\epsilon_0 - \mu)$ in der Entropie zugunsten von N. Sollte dabei nicht unser früheres $S^{\rm ex} = M \ln(M) - N \ln(N) - (M - N) \ln(M - N)$ zum Vorschein kommen ?!

(c) *Mapping*. Die M–fache Summe aus (a) kann auch als solche über die Eigenwerte s_k ($s_k = \pm 1$) der in Übung 26 auftauchenden σ^z–Matrizen geschrieben werden. Dabei kommt die dortige kanonische Zustandssumme $Z_{\rm Ising}$ ins Spiel. Mehr noch, es gilt perfekt $Z_{\rm gr}(T, ?, ?, ?) = e^{-\beta N f(J,b)}\, Z_{\rm Ising}(T, N, J, b)$ nämlich mit den Übersetzungsregeln $M \to ?$, $\mu - \epsilon_0 \to ?$, $\epsilon_1 \to ?$ und $f(J, b) = ?$

$1 + 2 + 2 =$ 5

26) Das 1D Ising–Modell

Auf jedem von N Plätzen, 1D und periodisch angeordnet (Platz $N+1$ ist Platz 1) sitzt ein lokalisierter $\frac{1}{2}$–Spin. Im Magnetfeld ($\mu \vec{B} =: \vec{b}$) hat er seinen Beitrag $-b\,\sigma^z_k$ zum Hamilton–Operator. Mit Lösbarkeit im Sinn hat nun der Dr. Ernest Ising (1900–1998) die $\vec{\sigma}\vec{\sigma}$–Wechselwirkung nächst–benachbarter Spins auf ihren $\sigma^z\sigma^z$–Anteil reduziert :

$$H = -b \sum_{k=1}^{N} \sigma^z_k - J \sum_{k=1}^{N} \sigma^z_k \sigma^z_{k+1} \qquad (*)$$

Die kanonische Zustandssumme Z läßt sich unverzüglich zu Papier bringen.

1

27) Die Lösung des 1D Ising–Modells

Den Hamilton–Operator $(*)$ aus Übung 26 kann man auch folgendermaßen aufschreiben :

$$H = \sum_{k=1}^{N} H_{k,k+1} \qquad \text{mit} \qquad H_{k,k+1} := -\frac{1}{2} b \left(\sigma^z_k + \sigma^z_{k+1} \right) - J \sigma^z_k \sigma^z_{k+1} \ .$$

(a) Ausgehend von dieser Version soll Z die Gestalt ${\rm Sp}\left(P^N\right)$ bekommen. Geht man zuerst auch hier von σ^z 's zu s_k–Quantenzahlen über (der einfachere Weg) und schreibt $e^{-\beta H}$ als Produkt, so kann jedem „Zwischenraum" zwischen zwei Faktoren eine der s_k–Summen zugeordnet und als Matrixmultiplikation gelesen werden. Was für Matrizen multiplizieren sich dann dabei ? Sie haben die T r a n s f e r m a t r i x P erfunden. Es ist eine $2 * 2$–Matrix.

((Falls obiges schwierig erscheint – oder zur Kontrolle – können Sie auch quantenmechanisch bleiben und Z als Spur über die H–Eigenzustände schreiben, welche Produkte aus $|s_k\rangle$'s sind und ein VONS bilden. VONS-e einschieben in jeden Zwischenraum? Dann erhält man

$$P = \begin{pmatrix} \langle +|\langle +|\, e^{-\beta H_{k,k+1}} |+\rangle|+\rangle & \langle +|\langle -|\, e^{-\beta H_{k,k+1}} |+\rangle|-\rangle \\ \langle -|\langle +|\, e^{-\beta H_{k,k+1}} |-\rangle|+\rangle & \langle -|\langle -|\, e^{-\beta H_{k,k+1}} |-\rangle|-\rangle \end{pmatrix} \quad \text{wobei}$$

der erste bra ein $\langle s_k|$
der zweite bra ein $\langle s_{k+1}|$
der erste ket ein $|s_k\rangle$
der zweite ket ein $|s_{k+1}\rangle$ ist.))

(b) Welche Eigenwerte hat P ? Welche Form nimmt damit die Zustandssumme Z an und welche die Freie Energie F ? Wie erklärt es sich, daß im thermodynamischen Limes ($N \to \infty$, F extensiv) nur einer (welcher) der beiden Eigenwerte überlebt ?

(c) F kennend, können wir die Magnetisierung M ausrechnen ($\partial_B = \mu \partial_b$). Reduzieren wir M auf den in b linearen Term (B klein), so zeigt der Vorfaktor $\alpha = ?$ in $M = \alpha \frac{N\mu^2}{T} B$ den Effekt der Wechselwirkung J.

$2 + 2 + 2 =$ 6