

Wdh

• von der -Wahl-Gl. aus Urroute.



$$\left( P + \alpha \frac{U^2}{V^2} \right) \left( V - U \cdot b \right) = U \cdot k_B T \rightarrow P(T)$$

$$\left( \tilde{P} + \frac{1}{\tilde{V}^2} \right) (\tilde{V} - 1) = \tilde{T}$$

•  $\tilde{V} \gg 1$   
•  $\tilde{T} \gg 1$

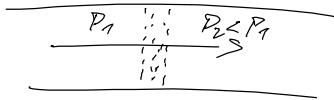
• innere Energie  $u(T, V) \rightarrow$  Ableitung bei Überstrichversuch

•  $p(T), C_V(T) \rightarrow$

$$\left( \frac{\partial u}{\partial T} \right)_V = C_V(T) \quad \left( \frac{\partial u}{\partial V} \right)_T = T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_V - p(T, V)$$

• Joule-Thomson-Effekt

? Ableitung oder Erwartung



$\rightarrow$  Joule-Thomson-Effekt ist konstant

$$\left( \frac{\partial T}{\partial p} \right)_H = \frac{V}{C_p} (\alpha \cdot T - 1) = \mu$$

$\mu > 0 \rightarrow$  Abkühlung  
 $\mu < 0 \rightarrow$  Erwärmung

Spin

2.4 Spinsysteme

• diskrete Energie  $E_n$

• endliche Anzahl

• mehrere Spins  $s \rightarrow s_i$

• einfach sind aber nicht-ein Spins:  $E_{n_1, n_2, \dots} = \sum_{i=1}^N E_{s_i}$

$$Z = \sum_{n_1} \dots \sum_{n_N} e^{-\beta E_{n_1, \dots, n_N}}$$

bei  $s \in \{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\}$   
 $\rightarrow 2^N$  Kombinationen

2.4.1. Paramagnetismus

• geb.  $e^-$  Q.Z.  $\hat{S} = \hat{L} + \hat{S}$   $\rightarrow \hat{S}$  ist quantisiert

$$\hat{S}^z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

$$m \in \{-j, -j+1, \dots, +j-1, +j\}$$

$\rightarrow$  bei Externem Feld  $H = -\vec{B} \cdot \vec{\mu}$   $\vec{B} = B_{ext} \hat{e}_z$

$$= -\frac{g \mu_B}{\hbar} \cdot B_{ext} \cdot \hat{S}^z$$

$\rightarrow$  Energien sind quantisiert

$$E_m = -\hbar \omega \quad \omega = \frac{g \mu_B B_{ext}}{\hbar}$$

$$\rightarrow Z_{qm} = \sum_{m=-j}^{+j} e^{-\beta E_m} = \sum_{m=-j}^{+j} e^{+\beta \cdot \hbar \omega \cdot m}$$

$$S_j = \sum_{m=-j}^{+j} e^{+\beta \cdot \hbar \omega \cdot m}$$

$$S_{j+1} = S_j + e^{+\beta \cdot \hbar \omega \cdot j} + e^{-\beta \cdot \hbar \omega \cdot j} = e^a \cdot S_j + e^{-a(j+1)} + e^{-a \cdot j}$$

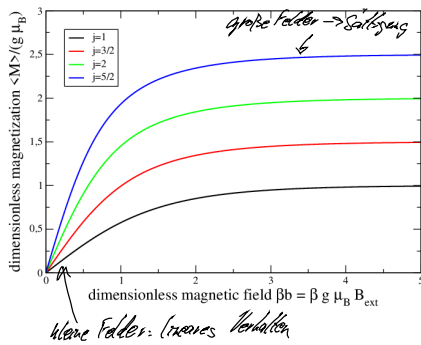
$\rightarrow$  auch  $S_j$  ableiten

$$\rightarrow Z_C = \frac{\sinh(\beta \hbar \omega (j + \frac{1}{2}))}{\sinh(\beta \hbar \omega / 2)}$$

$$E_n = -b \cdot n$$

$$\langle n \rangle = + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial b} \ln Z_0$$

→ Brillouin-Funktion



kleine Felder sind linear

$$M = \frac{g \mu_B}{2} \langle \sum_i \sigma_i \rangle \approx \frac{\beta g^2 \mu_B^2}{3} j(j+1) \cdot B_{ext}$$

$\chi_M$

$$B_{ext} \stackrel{!}{=} h$$

→ lineare Näherung in ED bricht zusammen für

- starke Felder
- hohe Temp.

} separ für nicht-1D Spins

⇒ Was passiert bei Spz-Spz - WW?

⇒ schwierig ⇒ ungenaue Modelle

### 2.4.2. Klass. 1d Ising-Modell

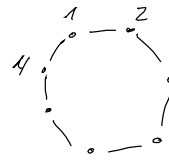
N Spins  $\sigma_i \in \{-1, +1\}$

$$E(\{\sigma_i\}) = E(\underline{\sigma}) = \sum_{i=1}^N (-b) \cdot \sigma_i + \sum_{i=1}^N (-J) \sigma_i \cdot \sigma_{i+1}$$

↑  
externes Feld

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1$$

↑  
Nachste-Nachbar - WW



$$b \geq 0 \quad \& \quad J \geq 0$$

var b : minimale Energie bei  $\sigma_1 = \dots = \sigma_N = +1$

var J : - " -  $(\sigma_i = +1 \quad \forall_i)$  oder  $(\sigma_i = -1 \quad \forall_i)$

$$Z_0 = \sum_{\underline{\sigma}} e^{-\beta \cdot E_{\underline{\sigma}}} = \sum_{\underline{\sigma}} \exp \left[ \beta \cdot J \cdot \sigma_1 \cdot \sigma_2 + \frac{\beta \cdot b}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) \right] \cdot \dots \cdot \exp \left[ \beta \cdot J \cdot \sigma_N \cdot \sigma_1 + \frac{\beta \cdot b}{2} (\sigma_N + \sigma_1) \right]$$

$$\text{Transfermatrix } T = \begin{pmatrix} e^{+\beta(7-b)} & e^{-\beta \cdot J} \\ e^{-\beta \cdot J} & e^{+\beta(7+b)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{--} & T_{-+} \\ T_{+-} & T_{++} \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow Z_C = \sum_{\vec{b}} T_{b_1 b_2} \cdot T_{b_2 b_3} \cdot \dots \cdot T_{b_N b_1} \quad b_i \in \{-1, +1\}$$

$$\sum_{\vec{b}} = \sum_{b_1 \in \{-1, +1\}} \dots \sum_{b_N \in \{-1, +1\}}$$

$$\rightarrow Z_C = \text{Tr} \left\{ \underbrace{T \cdot T \cdot \dots \cdot T}_{N\text{-mal}} \right\} = \text{Tr} \{ T^N \} = \text{Tr} \{ U T^N U^\dagger \}$$

$$= \lambda_-^N + \lambda_+^N \quad \lambda_{\pm} \text{ sind EW der Transfer matrix}$$

$$\lambda_- \leq \lambda_+$$

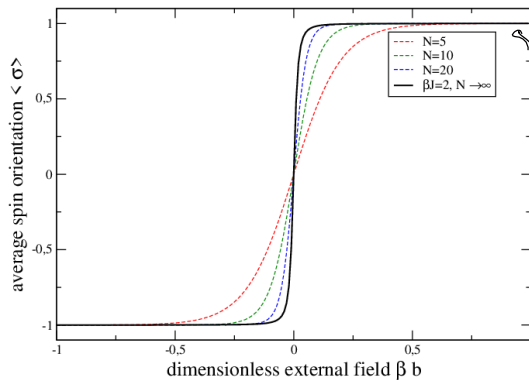
$\rightarrow$  nach Entwicklung in TD-Lösung  $N \rightarrow \infty$

$$Z_C = \lambda_+^N \left( 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \rightarrow \lambda_+^N \quad \rightarrow \ln Z_C \rightarrow N \cdot \ln \lambda_+$$

$\rightarrow$  mittlere Magnetisierung

$$\sum_i b_i = \frac{1}{\beta} \cdot \partial_b \ln Z_C$$

$$\sum_i b_i \langle b_i \rangle = \frac{1}{\beta} \cdot \partial_T \ln Z_C$$

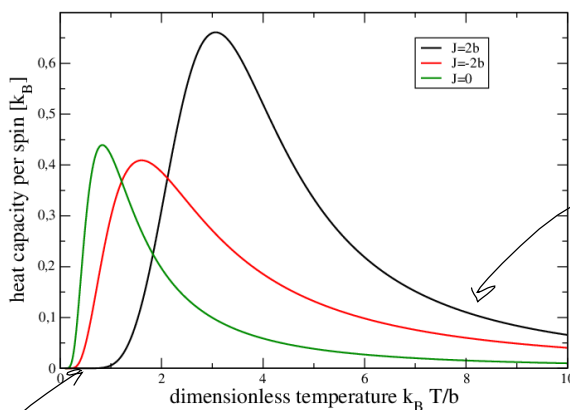


Wie bei well-46 Spins: Annäherung

$\rightarrow$  für  $N \rightarrow \infty$  erhält man eine differbare Fkt

• Suszeptibilität konst und von  $T$  ab

$$C_V = \left( \partial_T U \right)_V = - \partial_T \partial_{\beta} \ln Z_C$$



Unterschied zu Oszillatoren:  $C_V \rightarrow 0$  für große  $T$   
typisch für maximale Energie in System

exp. Inkrementierung: typisch für Systeme mit gap über dem Grundzustand  
aber: 2d: gibt es einen Phasenübergang

### 2.4.3 klassische Curie-Weiss-Modell

$$E_{\underline{S}} = -b \sum_{i=1}^N \sigma_i - \frac{z}{2N} \sum_{ij=1}^N \sigma_i \sigma_j$$



↑  
wichtig für Existenz des TD-Lösung

man ist approximative Lösung

$$Z_C = \sum_{\underline{S}} \exp \left\{ \beta b \sum_i \sigma_i + \frac{\beta z}{2N} \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 \right\} \quad Z^N \text{ lokal}$$

$$e^{\frac{b^2}{2a}} = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 + b \cdot x} dx \quad a > 0 \quad \int e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\exp \left\{ + \frac{\beta z}{2N} \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 \right\} = \sqrt{\frac{N \cdot \beta z}{2N}} \int \exp \left\{ - \frac{\beta z}{2} x^2 + \beta \cdot z \left( \sum_i \sigma_i \right) \cdot x \right\} dx$$

$$\bar{a} = \frac{N \cdot \beta z}{2} \quad \bar{b} = \beta \cdot z \left( \sum_i \sigma_i \right)$$

$$\rightarrow Z_C = \sqrt{\frac{N \cdot \beta z}{2N}} \int e^{-\frac{\beta z}{2} x^2} \left[ \sum_{\underline{S}} e^{\beta (z \cdot x + b) \cdot \sum_i \sigma_i} \right] dx$$

← S kann man ausrechnen

$$S = \left( e^{+\beta(z \cdot x + b)} + e^{-\beta(z \cdot x + b)} \right)^N = \left[ 2 \cdot \cosh(\beta(z \cdot x + b)) \right]^N$$

$$= e^{N \cdot \ln [2 \cdot \cosh(\beta(z \cdot x + b))]}$$

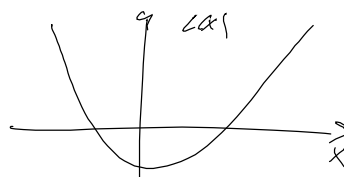
$$Z_C = \sqrt{\frac{N \cdot \beta z}{2N}} \int e^{-\beta z \cdot L(x)} dx \quad \text{Landen-Funktion } L(x)$$

$$L(x) = \frac{z}{2} \cdot x^2 - \frac{1}{\beta} \cdot \ln [2 \cdot \cosh(\beta(z \cdot x + b))]$$

→ Integral konvergiert

→ Integralbeiträge von konvergiert  
in  $L(x)$  minimal ist

⇒ Sattelpunktsnäherung



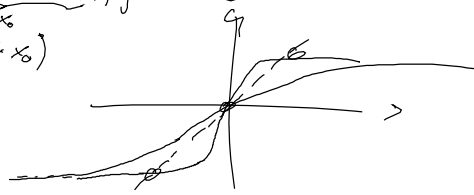
$$L(x) \approx L(x_0) + \frac{1}{2} L''(x_0) (x-x_0)^2 + \dots$$

$$\text{Cond. 1: } L'(x) = 7[x - \tanh(\beta(7x+b))] \stackrel{!}{=} 0 \quad \rightarrow x_0 = \tanh(\beta(7x_0+b))$$

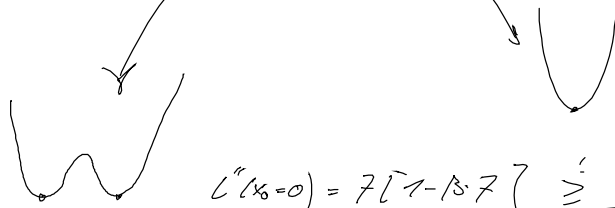
$$L''(x) = 7[1 - \beta 7(1 - \tanh^2(\beta(7x+b)))] \stackrel{!}{\geq} 0$$

bestimme jetzt:  $\lim_{\beta \rightarrow \infty}$

$$x_0 = \tanh(\beta \cdot 7 \cdot x_0)$$



=> entweder eine oder drei Lösungen  $x_0 = 0$



$$L''(x_0=0) = 7[1 - \beta 7] \stackrel{!}{\geq} 0 \quad \rightarrow \beta_c \cdot 7 = 1 = \frac{7}{k_B T_c}$$

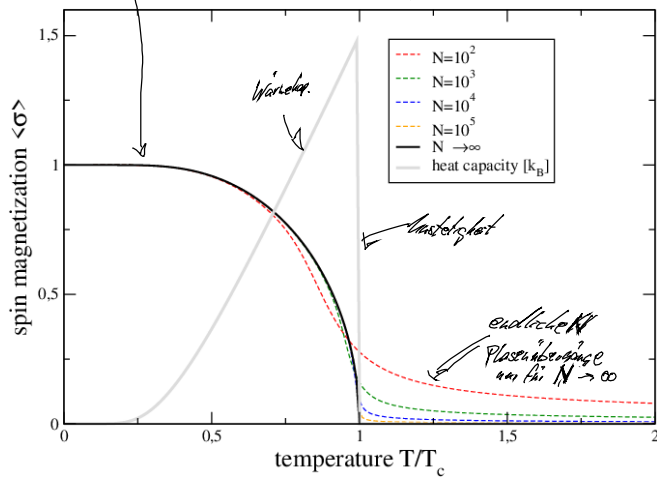
$$x_0 = \tanh(\beta \cdot 7 \cdot x_0) : x_0 > 0$$

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} L(x_0) = \begin{cases} -\frac{1}{\beta} \ln 2 & : T > T_c \\ \frac{7}{2} x_0^2 - \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta \cdot 7 \cdot x_0)] & : T < T_c \end{cases}$$

$$T_c = \frac{7}{k_B}$$

Curie-Temperatur

$$\langle \sigma \rangle = \tanh(\beta \cdot 7 \cdot x_0) \quad \text{für } N \rightarrow \infty$$



Zusammenbruch der Magnetisierung

$$Wk: \text{aus } -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_c = C_V = -T \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} = L(x_0)$$