

1 Bsp17 Gibbs Paradoxon

Bei Verwendung der richtigen Entropie mit dem Faktor $1/N!$ (Sackur-Tetrode-Gleichung) erhält man eine verschwindende Entropieänderung:

$$\rightarrow S_sack(E,V,n) := k \cdot n \cdot \left(\log \left(\frac{V}{n} \left(\frac{4\pi m E}{3n h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right) + \frac{5}{2} \right);$$

$$S_sack(E, V, n) := kn \left(\log \left(\frac{V}{n} \left(\frac{4\pi m E}{3n h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right) + \frac{5}{2} \right) \quad (\% \text{ o1})$$

$$\rightarrow S_sack(2 \cdot E, 2 \cdot V, 2 \cdot n) - 2 \cdot S_sack(E, V, n);$$

$$0 \quad (\% \text{ o2})$$

Vernachlässigt man den $1/N!$ Faktor bei der Sackur-Tetrode-Gleichung, erhält man das von Hand berechnete Ergebnis:

$$\rightarrow S_sack_falsch(E,V,n) := k \cdot (n \cdot \log(n) - n) + S_sack(E,V,n);$$

$$S_sack_falsch(E, V, n) := k (n \log(n) - n) + S_sack(E, V, n) \quad (\% \text{ o6})$$

$$\rightarrow S_sack_falsch(2 \cdot E, 2 \cdot V, 2 \cdot n) - 2 \cdot S_sack_falsch(E, V, n);$$

$$k (2n \log(2n) - 2n) - 2 \left(k (n \log(n) - n) + k \left(\log \left(\frac{8\pi^{\frac{3}{2}} V \left(\frac{Em}{n} \right)^{\frac{3}{2}}}{3^{\frac{3}{2}} h^2 |h| n} \right) + \frac{5}{2} \right) n \right) + 2k \left(\log \left(\frac{8\pi^{\frac{3}{2}} V \left(\frac{Em}{n} \right)^{\frac{3}{2}}}{3^{\frac{3}{2}} h^2 |h| n} \right) + \frac{5}{2} \right) \quad (\% \text{ o7})$$

$$\rightarrow \text{ratsimp}(\%);$$

$$2kn \log(2n) - 2kn \log(n) \quad (\% \text{ o8})$$

$$\rightarrow \text{radcan}(\%);$$

$$2 \log(2) kn \quad (\% \text{ o9})$$

17)

PS

Das Phasenraumvolumen ohne den Faktor $\frac{1}{N!}$ lautet

$$\Phi(E) = \frac{V^N}{h^{3N}} \frac{(2\pi m E)^{\frac{3N}{2}}}{\left(\frac{3N}{2}\right)!}$$

Die Entropie ist daher

$$S = k_B \ln(\Phi) = k_B \left[\ln \left(\frac{V^N}{h^{3N}} \frac{(2\pi m E)^{\frac{3N}{2}}}{\left(\frac{3N}{2}\right)!} \right) \right]$$

Stirling
 \downarrow
 \approx

$$k_B \left[\ln \left(\frac{V^N}{h^{3N}} (2\pi m E)^{\frac{3N}{2}} - \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{3N}{2} \right) + \frac{3N}{2} \right) \right]$$

$$= k_B \left[N \ln \left(\frac{V}{h^3} (2\pi m E)^{\frac{3}{2}} \right) - \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{3N}{2} \right) + \frac{3N}{2} \right]$$

Da $E_1 = E_2$, $V_1 = V_2$ und $N_1 = N_2$ ist die Entropiedifferenz

$$\Delta S = S(2E, 2V, 2N) - 2 S(E, V, N)$$

$$= k_B \left[2N \ln \left(\frac{2V}{h^3} (2\pi m \cdot 2E)^{\frac{3}{2}} \right) - 3N \ln(3N) + 3N \right]$$

$$- 2N \ln \left(\frac{V}{h^3} (2\pi m E)^{\frac{3}{2}} \right) + 3N \ln \left(\frac{3N}{2} \right) - 3N \right] = \%$$

$$2N \ln(2^{5/2})$$

$$3N \ln \left(\frac{3N}{2} \frac{1}{3N} \right) = 3N \ln \left(\frac{1}{2} \right)$$

$$\% = k_B \left[2N \ln(2^{5/2}) + 3N \ln \left(\frac{1}{2} \right) \right]$$

$$= k_B N \ln \left(\frac{2^5}{2^3} \right) = 2 k_B N \ln(2) \neq 0$$

18. E-Ink

Wir betrachten eine e-Ink Anzeige bestehend aus N kleinen Kugeln. Eine Hälfte jeder Kugel ist schwarz, die andere weiß. Jede Kugel sei ein unverschiebbarer aber frei drehbarer elektrischer Dipol mit Dipolmoment $d_0 \hat{q}_n$ in einem externen elektrischen Feld $E_0 \hat{z}$. Wir nehmen an, dass die Hamiltonfunktion nur von den Richtungsvektoren der Dipole \hat{q}_n abhängt:

$$H(\underline{q}) = -E_0 d_0 \sum_{n=1}^N \hat{z} \cdot \hat{q}_n \quad \text{mit } \underline{q} = (\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_N) \text{ und } |\hat{q}_n| = 1.$$

Die Abhängigkeit von den Drehimpulsen vernachlässigen wir, da wir nur an konfigurationsabhängigen Erwartungswerten $A(\underline{q})$ interessiert sind.

- (a) Zeige, dass die kanonische Zustandssumme über den Konfigurationsraum gegeben ist durch

$$Z(\beta, E_0, N) = \int d^{3N} q \prod_{n=1}^N \delta(|\hat{q}_n| - 1) \exp\{-\beta H(\underline{q})\} = \left(\frac{4\pi \sinh(\beta E_0 d_0)}{\beta E_0 d_0} \right)^N.$$

Warum fehlt der Faktor $1/N!$ in der Zustandssumme? h sei 1.

- (b) Um einen beliebigen konfigurationsabhängigen Ensemble-Erwartungswert

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(\beta, E_0, N)} \int d^{3N} q \prod_{n=1}^N \delta(|\hat{q}_n| - 1) A(\underline{q}) \exp\{-\beta H(\underline{q})\}$$

zu berechnen, können wir eine parametrisierte Hamiltonfunktion einführen $H_\lambda(\underline{q}) = H(\underline{q}) + \lambda A(\underline{q})$ mit dem frei wählbaren Parameter λ . Zeige, dass der Erwartungswert $\langle A \rangle$ dann mit Hilfe der λ -parametrisierten Zustandssumme $Z_\lambda(\beta, E_0, N)$ für diese Hamiltonfunktion durch

$$\langle A \rangle = \left. \frac{\partial F_\lambda(\beta, E_0, N)}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0}$$

mit $F_\lambda = -\beta^{-1} \log Z_\lambda$ gefunden werden kann.

- (c) Benutze die Methode aus (b) um den Erwartungswert der durchschnittlichen Ausrichtung in z -Richtung, $\langle z \rangle$, mit $z(\underline{q}) = \sum_n \hat{z} \cdot \hat{q}_n / N$ zu finden, der angibt, wie schwarz oder weiß die Pixel wirklich sind, wenn sie mit der elektrischen Feldstärke $\pm E_0$ angesteuert werden. Zeige $\langle z \rangle = \coth(\beta E_0 d_0) - (\beta E_0 d_0)^{-1}$ und skizziere $\langle z \rangle$ als Funktion von $\beta E_0 d_0$.

(a)

$$\begin{aligned}
Z(\beta, E_0, N) &= \int d^{3N} q \prod_{n=1}^N \delta(|\vec{q}_n| - 1) \exp\{-\beta H(\underline{q})\} \\
&= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^1 d\theta d\phi dr \sin \theta r^2 \prod_{n=1}^N \delta(r - 1) \exp\{\beta E_0 d_0 \cos \theta\} \\
&= \prod_{n=1}^N 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \exp\{\beta E_0 d_0 \cos \theta\} \quad | \quad d\theta = \frac{d \cos \theta}{\sin \theta} \\
&= \prod_{n=1}^N 2\pi \int_{-1}^1 d \cos \theta \exp\{\beta E_0 d_0 \cos \theta\} \\
&= \prod_{n=1}^N 2\pi \frac{\exp\{\beta E_0 d_0 \cos \theta\}}{\beta E_0 d_0} \Big|_{-1}^1 = \prod_{n=1}^N 2\pi \frac{2 \sinh(\beta E_0 d_0)}{\beta E_0 d_0} \\
&= \left(\frac{4\pi \sinh(\beta E_0 d_0)}{\beta E_0 d_0} \right)^N
\end{aligned}$$

Der Faktor $N!$ fehlt, weil die einzelnen Teilchen einen fixen Platz haben und dadurch nicht permutiert werden können.

(b)

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z_\lambda(\beta, E_0, N)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_\lambda} \frac{\partial Z_\lambda(\beta, E_0, N)}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda=0} \\
&= -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_\lambda} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\int d^{3N} q \prod_{n=1}^N \delta(|\vec{q}_n| - 1) e^{-\beta(H(\underline{q}) + \lambda A(\underline{q}))} \right) \Big|_{\lambda=0} \\
&= -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_\lambda} \int d^{3N} q \prod_{n=1}^N \delta(|\vec{q}_n| - 1) e^{-\beta(H(\underline{q}) + \lambda A(\underline{q}))} (-\beta A(\underline{q})) \Big|_{\lambda=0} \\
&= \frac{1}{Z(\beta, E_0, N)} \int d^{3N} q \prod_{n=1}^N \delta(|\vec{q}_n| - 1) A(\underline{q}) e^{-\beta H(\underline{q})} = \langle A \rangle
\end{aligned}$$

(c) Zuerst schreiben wir unsere Hamiltonfunktion an: $H_\lambda = (-E_0 d_0 + \frac{\lambda}{N}) \sum_{n=1}^N \hat{z} \cdot \hat{q}_n$. Mit dem Ergebnis aus a) können wir gleich die Zustandssumme schreiben und ableiten:

$$\begin{aligned}
\langle z \rangle &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \lambda} \log \left(\left[\frac{4\pi \sinh(\beta (E_0 d_0 - \frac{\lambda}{N}))}{\beta (E_0 d_0 - \frac{\lambda}{N})} \right]^N \right) \Big|_{\lambda=0} \\
&= -\frac{N}{\beta} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\log(4\pi) + \log \left(\sinh(\beta (E_0 d_0 - \frac{\lambda}{N})) \right) - \log(\beta (E_0 d_0 - \frac{\lambda}{N})) \right) \Big|_{\lambda=0} \\
&= -\frac{N}{\beta} \left(\frac{\cosh(\beta (E_0 d_0 - \frac{\lambda}{N})) \frac{-\beta}{N}}{\sinh(\beta (E_0 d_0 - \frac{\lambda}{N}))} - \frac{\frac{-\beta}{N}}{\beta (E_0 d_0 - \frac{\lambda}{N})} \right) \Big|_{\lambda=0} \\
&= \coth(\beta E_0 d_0) - \frac{1}{\beta E_0 d_0}
\end{aligned}$$

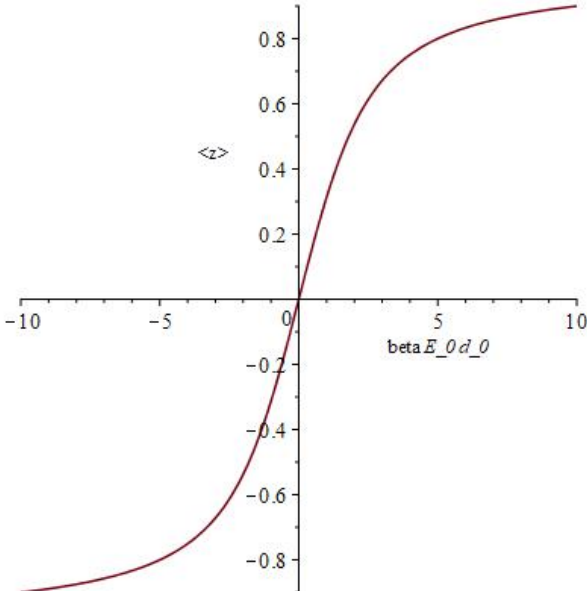


Abb. 1: Ausrichtung

Wir betrachten $N = 4$ ununterscheidbare magnetische Kugeln auf $V = 4$ Feldern. Die Position der n -ten Kugel sei vollständig durch die Angabe der Feldnummer $q_n \in \{1, \dots, 4\}$ bestimmt und wir vernachlässigen deren Impulsbeiträge. Bis zu 4 Kugeln können jedoch das gleiche Feld besetzen und einen magnetisch verbundenen Cluster bilden. Jedes verbundene Paar von Kugeln hat die Bindungsenergie U . Die Hamiltonfunktion ist diskret und lautet

$$H(\underline{q}) = -U \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=n+1}^N \delta_{q_n q_m} \quad \text{mit} \quad \underline{q} = (q_1, \dots, q_N), q_N \in 1, \dots, V$$

und dem Kronecker-Delta $\delta_{ij} = 1$ für $i = j$ und 0 sonst.

- Skizziere alle 5 Möglichkeiten, die Kugeln in Cluster einzuteilen und finde zu jeder davon die Anzahl der möglichen Anordnungen, diese Cluster von Kugeln auf die Felder zu verteilen.
- Werte die Hamiltonfunktion für jede der 5 Möglichkeiten aus und zeige damit, dass die kanonische Zustandssumme über den Konfigurationsraum als Funktion von $\xi = \beta U$ gegeben ist durch $4e^{6\xi} + 12e^{3\xi} + 6e^{2\xi} + 12e^\xi + 1$.
- Zeige, dass der Erwartungswert der Anzahl an besetzten Feldern $\langle B \rangle$ mit

$$B(\underline{q}) = V - \sum_{i=1}^V \prod_{n=1}^N (1 - \delta_{iq_n})$$

gegeben ist durch $(4e^{6\xi} + 24e^{3\xi} + 12e^{2\xi} + 36e^\xi + 4)/Z(\xi)$. Skizziere die Funktion und finde den Grenzwert verschwindender magnetischer Bindung $U \rightarrow 0$.

(a)

Wir können einfach die folgenden Konfigurationen finden.

Konfigurationen	Permutationsanzahl a_i
(1) · · · ·	$\binom{4}{0} = \binom{4}{0 \ 0 \ 0 \ 4 \ 0} = 1$
(2) .. · · ·	$\binom{4}{1} \binom{3}{1} = \binom{4}{0 \ 0 \ 1 \ 2 \ 1} = 12$
(3) ... · · ·	$\binom{4}{2} \binom{2}{1} = \binom{4}{0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 2} = 12$
(4) · · ·	$\binom{4}{3} = \binom{4}{1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 3} = 4$
(5) · ·	$\binom{4}{2} = \binom{4}{0 \ 0 \ 2 \ 0 \ 2} = 6$

Die Anzahl der dazugehörigen Permutation ergibt sich durch Auswahl der leeren Felder und anschließender Auswahl der von den anderen unterscheidbar befüllten Feldern. Alternativ kann man auch den Multinomialkoeffizienten verwenden, dieser stellt die Verallgemeinerung des Binomialkoeffizienten dar und funktioniert wie folgt:

$$\binom{n}{k_1 \ k_2 \ \dots \ k_m} = \frac{n!}{k_1! k_2! \dots k_m!} \quad \text{mit} \quad \sum_{i=1}^m k_i = n.$$

Hierbei spiegelt jedes k_i eine unterscheidbare Klasse wider - in unserem Fall die Anzahl der Boxen mit einer definierten Anzahl an in ihr befindlichen Kugeln, wobei k_1 jene Anzahl an Boxen widerspiegelt, welche 4 Kugeln beherbergen, k_2 jene mit 3 Kugeln und k_4 jene Anzahl an Boxen, welche unbesetzt bleiben.

(b)

Einfaches Auswerten der Hamilton Funktion führt uns für die jeweilige Konfiguration zu folgenden Werten.

Konfiguration	H_i
(1)	0
(2)	$-U$
(3)	$-3U$
(4)	$-6U$
(5)	$-2U$

Dies führt, unter Verwendung der Formel für die diskrete kanonische Zustandssumme, der Berücksichtigung der Permutationsanzahl a_i , welche einem Entartungsgrad entspricht, für die jeweilige Konfiguration und der Substitution $\xi = \beta U$, zum geforderten Ausdruck.

$$\begin{aligned}
Z_k &= \sum_i a_i e^{-\beta E_i} \\
&= 1e^0 + 12e^{\beta U} + 12e^{3\beta U} + 4e^{6\beta U} + 6e^{2\beta U} \\
&= 4e^{6\xi} + 12e^{3\xi} + 6e^{2\xi} + 12e^\xi + 1
\end{aligned}$$

(c)

Um uns den Erwartungswert der besetzten Felder auszurechnen, müssen wir entweder die in der Angabe gegebene Formel für die Anzahl der besetzten Felder für jede Konfiguration anwenden, oder wir zählen einfach anhand der Skizze in Unterpunkt (a) ab.

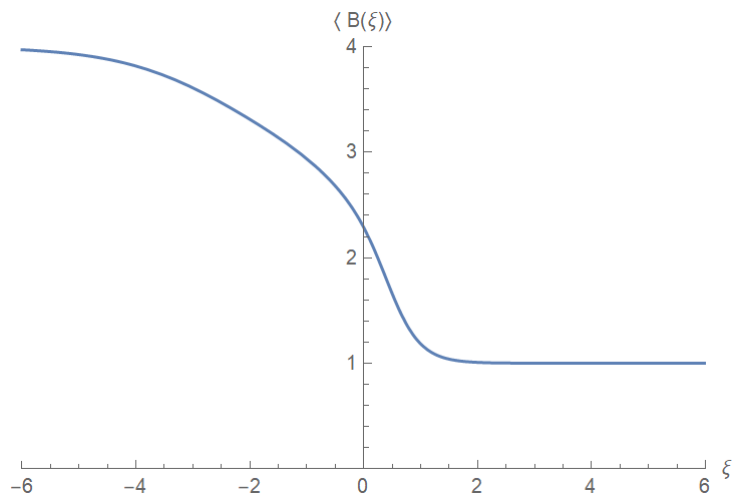
Konfiguration	$B_i(q)$
(1)	4
(2)	3
(3)	2
(4)	1
(5)	2

Nun können wir den Erwartungswert, unter Verwendung der Formel für diskrete Größen für kanonische Ensembles, sowie Berücksichtigung der Permutationsanzahl a_i für die einzelnen Konfigurationen, berechnen und durch abermaliges Anwenden der Substitution $\xi = \beta U$, zum gewünschten Ausdruck gelangen.

$$\begin{aligned}
\langle B \rangle &= \frac{1}{Z_k} \sum_i B_i(q) a_i e^{-\beta E_i} \\
&= \frac{1}{Z_k} (4(1e^0) + 3(12e^{\beta U}) + 2(12e^{3\beta U}) + 4(1e^{6\beta U}) + 2(6e^{2\beta U})) \\
&= \frac{1}{Z_k(\xi)} (4e^{6\xi} + 24e^{3\xi} + 12e^{2\xi} + 36e^\xi + 4)
\end{aligned}$$

Vollständig geschrieben ergibt sich daher die folgende Formel für $\langle B(\xi) \rangle$, anhand welcher wir dessen Verlauf und Grenzwert für verschwindende magnetische Bindung betrachten können.

$$\begin{aligned}
\lim_{U \rightarrow 0} \langle B(\xi) \rangle &= \lim_{\xi \rightarrow 0} \langle B(\xi) \rangle \\
&= \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{4e^{6\xi} + 24e^{3\xi} + 12e^{2\xi} + 36e^\xi + 4}{4e^{6\xi} + 12e^{3\xi} + 6e^{2\xi} + 12e^\xi + 1} \\
&= \frac{4 + 24 + 12 + 36 + 4}{4 + 12 + 6 + 12 + 1} \\
&= \frac{16}{7} \approx 2.29
\end{aligned}$$



Das Resultat für den Erwartungswert der besetzten Felder hätten wir auch erhalten, wenn wir rein aus Betrachtung der Skizze in (a) für die Anzahl an besetzten Felder x_i und der Permutationsanzahl a_i den Erwartungswert angesetzt hätten.

$$\begin{aligned}
 \langle B \rangle &= \frac{\sum_{i=1}^5 x_i a_i}{\sum_{i=1}^5 a_i} \\
 &= \frac{4(1) + 3(12) + 2(12) + 1(4) + 2(6)}{1 + 12 + 12 + 4 + 6} \\
 &= \frac{16}{7} \approx 2.29
 \end{aligned}$$

STATISTISCHE PHYSIK 1 - P5

20. Gegeben sei eine Kette aus N Spins $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ mit $\sigma_i = \pm 1$. Die Hamiltonfunktion lautet

$$H_{B,J}(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -B \sum_{i=1}^N \sigma_i - J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}.$$

B und J geben jeweils die Wechselwirkung mit dem äußeren Magnetfeld und zwischen benachbarten Spins an. Die Randbedingungen seien periodisch mit $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

- (a) Zeige, dass die kanonische Zustandssumme für die nicht-wechselwirkende Kette mit $J = 0$ im äußeren Magnetfeld B gegeben ist durch $Z_{B,J=0}(\beta, N) = (2 \cosh \beta B)^N$.
- (b) Sei $\tau_i = \sigma_i \sigma_{i+1}$ das Produkt zweier benachbarter Spins. τ_i ist also negativ, wenn sich die benachbarten Spins σ_i und σ_{i+1} in der Richtung unterscheiden und sonst positiv. Zeige, dass $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ und $(\sigma_1, \tau_1, \dots, \tau_{N-1})$ äquivalente Koordinaten des Konfigurationsraumes sind. D.h. es existiert eine bijektive Abbildung zwischen diesen Koordinaten. Verwende die Koordinaten τ_i , um folgende Abschätzung für die Zustandssumme $Z_{B=0,J}(\beta, N)$ der wechselwirkenden Spinkette ohne äußerem Feld zu zeigen:

$$\frac{e^{-\beta J}}{\cosh \beta J} Z_{J,0}(\beta, N) \leq Z_{B=0,J}(\beta, N) \leq \frac{e^{+\beta J}}{\cosh \beta J} Z_{J,0}(\beta, N).$$

- (c) Zeige damit, dass die freie Energie pro Spin $f_{B=0,J}(\beta, N) = F_{B=0,J}(\beta, N)/N$ im thermodynamischen Limes für $N \rightarrow \infty$ gegeben ist durch $-\beta^{-1} \log(2 \cosh \beta J)$. Finde danach den Limes von $f_{B=0,J}(\beta, N \rightarrow \infty)$ für $T \rightarrow 0$ und skizziere je eine mögliche Konfiguration bei $T = 0$ für $J > 0$ und für $J < 0$.

Lösung:

- (a) Für die nicht-wechselwirkende Kette mit $J = 0$ haben wir

$$H_{B,J=0}(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -B \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (1)$$

Die kanonische Zustandssumme ist gegeben durch

$$Z_{B,J=0}(\beta, N) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{B,J=0}(\sigma_1, \dots, \sigma_N)}, \quad (2)$$

wobei mit der Notation $\{\sigma\}$ gemeint ist, dass wir über alle möglichen Konfigurationen der N Spins summieren. Symbolisch lässt sich dies umschreiben in

$$\sum_{\{\sigma\}} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1}.$$

Damit ergibt sich die Zustandssumme zu

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{B,J=0}(\beta, N) &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta B \sum_{i=1}^N \sigma_i} \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm 1} e^{\beta B \sigma_1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} e^{\beta B \sigma_2} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta B \sigma_N} \\
&= \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\beta B \sigma_i}.
\end{aligned} \tag{3}$$

Da wir wissen, dass $2 \cosh(x) = e^x + e^{-x}$ ist, haben wir für die Zustandssumme

$$\mathcal{Z}_{B,J=0}(\beta, N) = \prod_{i=1}^N 2 \cosh(\beta B) = (2 \cosh(\beta B))^N. \tag{4}$$

- (b) Um zu zeigen, dass es eine eins-zu-eins Korrespondenz zwischen diesen beiden Koordinaten gibt, suchen wir die inverse Transformation

$$(\sigma_1, \tau_1, \dots, \tau_{N-1}) \rightarrow (\sigma_1, \dots, \sigma_N).$$

Da gilt, dass $\sigma_i = \pm 1$, haben wir die Identität $\sigma_i^2 = 1$. Damit ergibt sich die inverse Transformation zu

$$\sigma_2 = \sigma_1 \tau_1, \quad \sigma_3 = \sigma_1 \tau_1 \tau_2, \quad \dots, \quad \sigma_N = \sigma_1 \tau_1 \cdots \tau_{N-1}. \tag{5}$$

Der Hamiltonian mit $B = 0$ lässt sich mit diesen Koordinaten umschreiben in

$$H_{B=0,J}(\sigma_1, \tau_1, \dots, \tau_{N-1}) = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} = -J (\tau_1 + \tau_2 + \cdots + \tau_{N-1} + \sigma_N \sigma_1). \tag{6}$$

Der letzte Term ergibt sich aus den periodischen Randbedingungen. Durch Einsetzen von σ_N aus Gleichung (5), ergibt sich

$$H_{B=0,J}(\tau_1, \dots, \tau_{N-1}) = -J (\tau_1 + \tau_2 + \cdots + \tau_{N-1} + \tau_1 \tau_2 \cdots \tau_{N-1}), \tag{7}$$

wobei wir hier verwendet haben, dass $\sigma_1^2 = 1$ ist. Die Zustandssumme ist also gegeben durch

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{B=0,J}(\beta, N) &= \sum_{\{\sigma_1, \tau\}} e^{-\beta H_{B=0,J}(\tau_1, \dots, \tau_{N-1})} \\
&= 2 \sum_{\tau_1=\pm 1} \sum_{\tau_2=\pm 1} \cdots \sum_{\tau_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J (\tau_1 + \tau_2 + \cdots + \tau_{N-1} + \tau_1 \tau_2 \cdots \tau_{N-1})},
\end{aligned} \tag{8}$$

wobei sich der Faktor 2 aus den zwei möglichen Zuständen ± 1 von σ_1 ergibt. Aufgrund der periodischen Randbedingung und der resultierenden Kopplung zwischen den einzelnen τ_i , faktorisiert die Zustandssumme nun nicht mehr wie in Unterpunkt (a), was eine analytische Behandlung erschwert.

Wir wollen nun aber eine Abschätzung machen. Dafür sehen wir uns den Kopplungsterm an und erkennen, dass dieser entweder ± 1 sein kann. Mit einer ferromagnetischen Kopplungskonstante $J > 0$, können wir die Zustandssumme nach unten

abschätzen indem wir das Produkt gleich -1 setzen. Aus Gleichung (8) ergibt sich also

$$\begin{aligned}
& 2 \sum_{\tau_1=\pm 1} \sum_{\tau_2=\pm 1} \dots \sum_{\tau_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J(\tau_1+\tau_2+\dots+\tau_{N-1}-1)} \leq \mathcal{Z}_{B=0,J}(\beta, N) \\
\Leftrightarrow & 2e^{-\beta J} \sum_{\tau_1=\pm 1} e^{\beta J\tau_1} \sum_{\tau_2=\pm 1} e^{\beta J\tau_2} \dots \sum_{\tau_{N-1}=\pm 1} e^{\beta J\tau_{N-1}} \leq \mathcal{Z}_{B=0,J}(\beta, N) \\
\Leftrightarrow & 2e^{-\beta J} (2 \cosh(\beta J))^{N-1} \leq \mathcal{Z}_{B=0,J}(\beta, N) \\
\Leftrightarrow & \frac{e^{-\beta J}}{\cosh(\beta J)} \mathcal{Z}_{J,0}(\beta, N) \leq \mathcal{Z}_{B=0,J}(\beta, N).
\end{aligned}$$

Analog funktioniert die Abschätzung nach oben indem wir das Produkt gleich $+1$ setzen. Insgesamt ergibt sich das finale Resultat

$$\frac{e^{-\beta J}}{\cosh(\beta J)} \mathcal{Z}_{J,0}(\beta, N) \leq \mathcal{Z}_{B=0,J}(\beta, N) \leq \frac{e^{\beta J}}{\cosh(\beta J)} \mathcal{Z}_{J,0}(\beta, N). \quad (9)$$

- (c) Die freie Energie ist gegeben durch $F_{B=0,J}(\beta, N) = -\beta^{-1} \log(\mathcal{Z}_{B=0,J}(\beta, N))$. Wir nehmen den Logarithmus der linken Seite der Abschätzung aus Gleichung (9) und multiplizieren diesen zusätzlich mit $1/\beta N$, es folgt

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\beta N} [-\beta J - \log(\cosh(\beta J)) + \log(\mathcal{Z}_{J,0}(\beta, N))] \leq \frac{1}{\beta N} \log(\mathcal{Z}_{B=0,J}(\beta, N)) \\
\Leftrightarrow & \frac{J}{N} + \frac{1}{\beta N} \log(\cosh(\beta J)) - \frac{1}{\beta N} \log\left((2 \cosh(\beta J))^N\right) \geq \frac{F_{B=0,J}(\beta, N)}{N} \\
\Leftrightarrow & \frac{J}{N} + \frac{1}{\beta N} \log(\cosh(\beta J)) - \frac{1}{\beta} \log(2 \cosh(\beta J)) \geq \frac{F_{B=0,J}(\beta, N)}{N}.
\end{aligned}$$

Wir machen nun das gleiche für die rechte Seite der Abschätzung und erhalten dadurch

$$-\frac{J}{N} + \frac{1}{\beta N} \log(\cosh(\beta J)) - \frac{1}{\beta} \log(2 \cosh(\beta J)) \leq \frac{F_{B=0,J}(\beta, N)}{N}. \quad (10)$$

Im thermodynamischen Limes, $N \rightarrow \infty$, lässt sich unsere Abschätzung nun anschreiben als

$$-\frac{1}{\beta} \log(2 \cosh(\beta J)) \leq \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F_{B=0,J}(\beta, N)}{N} \leq -\frac{1}{\beta} \log(2 \cosh(\beta J)) \quad (11)$$

Wir sehen also, dass sich die freie Energie pro Spin im thermodynamischen Limes auf

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F_{B=0,J}(\beta, N)}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} f_{B=0,J}(\beta, N) = -\frac{1}{\beta} \log(2 \cosh(\beta J)) \quad (12)$$

konzentriert. Nun wollen wir uns noch den $T \rightarrow 0$, bzw. $\beta \rightarrow \infty$, Limes für diesen Ausdruck untersuchen. Dafür verwenden wir wieder die Identität, dass $\cosh(x) = (e^x + e^{-x})/2$ und schreiben

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} f_{B=0,J}(\beta, N) = -\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log(e^{\beta J} + e^{-\beta J}). \quad (13)$$

Für den Fall $J > 0$ und $\beta \rightarrow \infty$ können wir nun den Term $e^{-\beta J}$ innerhalb vom Logarithmus vernachlässigen (Analog können wir für $J < 0$ den Term $e^{\beta J}$ vernachlässigen). Dadurch vereinfacht sich die Rechnung und es ergibt sich

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} f_{B=0,J}(\beta, N) = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \beta |J| = -|J|. \quad (14)$$

Nun wollen wir noch mögliche Konfigurationen des Systems für den Grundzustand, $T = 0$ skizzieren. Für $J > 0$ wird die Energie des Systems, Gleichung (6), minimiert, indem benachbarte Spins gleich orientiert sind. Für $J < 0$ wird eine anti-parallele Orientierung benachbarter Spins bevorzugt. Diese beiden Situationen sind Abbildung 1 skizziert.

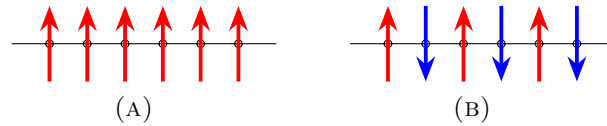


ABBILDUNG 1. Mögliche Konfiguration des Grundzustandes $T = 0$ für den Fall einer ferromagnetischen Kopplung $J > 0$ (A) und einer anti-ferromagnetischen Kopplung $J < 0$ (B).