Aufgabe 20: Binäre Legierungen

(4 Punkte)

Wir betrachten eine binäre Legierung, das heißt einen Kristall mit zwei Sorten von Atomen. Ein Beispiel hierfür ist β-Messing (siehe Abbildung 1).

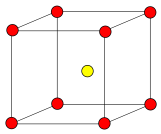

Abbildung 1: Messing-Elementarzelle mit Zn-Atomen (rot) und Cu-Atomen (gelb).

Ein perfekt geordneter Zustand existiert allerdings nur für $T = 0$. Für $T > 0$ vertauschen einige Zn-Atome mit den Cu-Atomen ihren Platz. Oberhalb einer kritischen Temperatur von $T_c = 742K$ ist die Wahrscheinlichkeit ein Zn-Atom bzw. ein Cu-Atom am "richtigen"Platz zu finden exakt 1/2. Die Energie pro Verbindung benachbarter Atome hängt von den jeweilgen Atomen (im Folgenden als A bzw. B bezeichnet) ab, die an den zugehörigen Plätzen sitzen:

Energie/Verbindung	n_i, n_j
ϵ_{AA}	A, A
ϵ_{AB}	A, B
ϵ_{AB}	B, A
ϵ_{BB}	B, B

Tabelle 1: Mögliche Verbindungen benachbarter Gitterplätze n_i, n_j und die dazugehörigen Energien.

Die Energie einer möglichen Konfiguration kann durch Zählen der Vebindungen berechnet werden:

$$E = \epsilon_{AA}N_{AA} + \epsilon_{AB}N_{AB} + \epsilon_{BB}N_{BB} \tag{1}$$

N_{AA}, N_{AB} und N_{BB} geben jeweils die Anzahl der Verbindungen an, sind aber nicht unabhängig voneinander. Für die Anzahl der Gitterplätze mit Atomen A, N_A, gilt

- $zN_A = 2N_{AA} + N_{AB}$,

für Gitterplätze mit Atomen B, N_B,

- $zN_B = 2N_{BB} + N_{AB}$,

wobei z die Koordinationszahl ist, und $N_A + N_B = N$.

1. Geben Sie die Energie einer möglichen Konfiguration an und erklären Sie warum eigentlich nur zwei Parameter notwendig sind. (2 Punkte)
2. Da im Ising-Modell auch nur zwei Parameter (J, h),
$$H = -J \sum_{<i,j>} s_i s_j - h \sum_i s_i, \tag{2}$$
die Thermodynamik bestimmen, sollen die beiden Systeme verbunden werden. Überlegen Sie sich, wie die Energien $\epsilon_{\alpha\beta}$, mit $\alpha, \beta = A$ oder B, dann von den Variablen J und h abhängen müssen. (2 Punkte)
Hinweis: Es sei $s_i^A = +1$ und $s_i^B = -1$.

Aufgabe 21: 1D-Ising-Modell

(4 Punkte)

Betrachten Sie ein Ising-Modell für N-Teilchen, welche allerdings nur mit ihren nächsten Nachbarn wechselwirken. Der zugehörige Hamiltonian sei

$$H = -J \sum_{j}^{N} s_j s_{j+1} + \mu B \sum_{j}^{N} s_j \tag{3}$$

wobei für die Spinvariablen $s_j = \pm 1$ gilt. Aufgrund periodischer Randbedingungen gilt, dass $s_{N+1} = s_1$.

1. Berechnen Sie die Zustandssumme dieses Modells und zeigen Sie, dass diese durch $Z_N = Tr(M^N)$ gegeben ist, wobei
$$M = \begin{pmatrix} e^{\beta(J-\mu B)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J+\mu B)} \end{pmatrix} \tag{4}$$
Transfermatrix heißt und $\beta = 1/k_B T$. (1 Punkt)

2. Betrachten Sie nun den thermodynamischen Limes $N \to \infty$ und zeigen Sie, dass die freie Energie pro Spin durch
$$f(T, B) = -k_B T \ln \epsilon_1 \tag{5}$$
gegeben ist und ϵ_1 den größten Eigenwert von M darstellt. (1 Punkt)

3. Berechnen Sie nun die Magnetisierung $m = -\partial f / \partial B$ und zeigen Sie, dass das System keinen Ferromagnetismus für Temperaturen $T > 0$ aufweist. (2 Punkt)