UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Statistischen Mechanik
Wintersemester 2005/06

Übungsblatt 5, Ausgabe 22.11.2005, abzugeben bis 28.11.2005
Besprechung in der Zentralübung am 28.11.2005.

Präsenzaufgaben

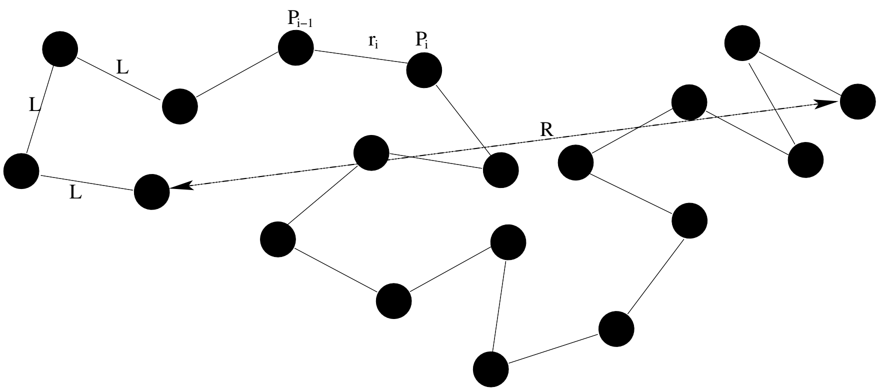
27. **Korrelationen von unabhängigen Spins**
Wir betrachten ein idealisiertes System von N unabhängigen Teilchen mit den Spinzuständen $\sigma_i = \pm 1$ in einem isotropen Ising Modell.

a) Berechnen Sie zunächst generell $\langle \sigma_i \rangle$ und $\langle (\delta\sigma_i)^2 \rangle$, wenn die Gesamtmagnetisierung im Mittel den Wert M annimmt.

b) Zeigen Sie nun, dass die Korrelationen $K_{ij} = \langle \delta\sigma_i \delta\sigma_j \rangle$ dem folgenden Ausdruck entsprechen:
$$K_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle.$$

c) Überzeugen Sie sich, dass sowohl in der kanonischen als auch in der mikrokanonischen Gesamtheit $P_2(\sigma_1 \sigma_2) = P_1(\sigma_1) P_1(\sigma_2)$ ist. Welche zusätzliche Annahme muss dabei für die mikrokanonische Gesamtheit gemacht werden? Was bedeutet dieses Ergebnis für die Korrelationsfunktion K_{ij}?

28. **Korrelationsfunktionen in Polymerketten**
Polymere werden im einfachsten Fall als Ketten von einzelnen Bausteinen (Monomeren) beschrieben.



a) Nehmen Sie eine Kette mit konstanter Gliedlänge L, deren Bestandteile keinerlei Wechselwirkung zeigen, sich also völlig ungehindert bewegen können. Was ist an diesem Modell grob unphysikalisch? Begründen Sie, warum die mittlere Gesamtlänge $\langle \mathbf{R} \rangle = \mathbf{0}$.

b) Mit einer homogenen Winkelverteilung kann man die Mittelung für eine Grösse $f(\vartheta, \varphi)$ als Integral schreiben:

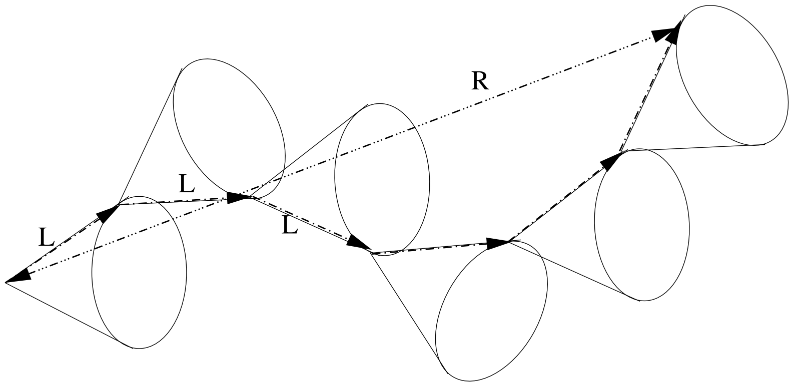
$$\langle f(\vartheta, \varphi) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin(\varphi) f(\vartheta, \varphi).$$

Wir sind aber interessiert an $f(\{\vartheta_i, \varphi_i\})$, das heisst einer Grösse, die alle $2N$ Winkel ϑ_i, φ_i einer Kette miteinbezieht. Finden Sie einen Ausdruck für $\langle f(\{\vartheta_i, \varphi_i\}) \rangle$. Wir definieren die Segmente

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{P}_i - \mathbf{P}_{i-1} = L \sin(\vartheta_i) \left(\cos(\varphi_i) \hat{\mathbf{i}} + \sin(\varphi_i) \hat{\mathbf{j}} \right) + L \cos(\vartheta_i) \hat{\mathbf{k}}.$$

Berechnen Sie sowohl $\langle \mathbf{R}(\{\vartheta, \varphi\}) \rangle$ als auch $\langle \mathbf{R}(\{\vartheta, \varphi\})^2 \rangle$.

c) Realistischer ist es, die Bewegungsfreiheit der Ketten ein wenig einzuschränken. Das gelingt, indem man den Winkel zwischen Nachbarbausteinen auf ϑ festlegt (siehe Abbildung). Überlegen Sie sich, dass nun der Korrelator $\langle \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j \rangle = L^2 (\cos(\vartheta))^{|i-j|}$. Finden Sie in diesem Modell der sogenannten *frei rotierenden Kette* einen Ausdruck für $\langle \mathbf{R}^2 \rangle$.



schriftlich

29. **Korrelationsfunktion des Isingmodells (6 Punkte)**
Im Ising Modell in einer Dimension ist die Korrelationsfunktion definiert durch:

$$G(i, j) = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle,$$

wobei die S_i als klassische Variablen interpretiert werden können, die die Werte $S_i = \pm 1$ annehmen. Zeigen Sie, dass gilt $G(i, j) = \langle S_i S_j \rangle$, d. h. $\langle S_i \rangle = 0$.

a) Zur Vereinfachung soll $G(i, j)$ ohne Magnetfeld berechnet werden, wozu eine Verallgemeinerung des Ising Hamiltonian verwendet werden kann. Die Verallgemeinerung besteht darin, verschiedene Wechselwirkungsstärken zwischen den Spins anzunehmen:

$$H = -\sum_i J_i S_i S_{i+1}.$$

Bestimmen Sie die Zustandssumme für diesen Hamiltonian mit der Technik, die in Aufgabe 26 Verwendung fand.

b) Zeigen Sie

$$G(i, i+1) = \frac{\partial}{\partial \beta J_i} \ln(Z)$$

und damit $G(i, i+1) = \tanh(\beta J_i)$. Diskutieren Sie die Temperaturabhängigkeit.

c) Zeigen Sie

$$G(i, i+2) = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta J_i} \frac{\partial}{\partial \beta J_{i+1}} Z$$

und damit, dass $G(i, i+2) = \tanh(\beta J_i) \tanh(\beta J_{i+1})$. Verallgemeinern Sie diese Rechentechnik, um $G(i, i+j)$ zu bestimmen, und setzen Sie letztlich alle Kopplungskonstanten $J_i = J$ gleich, um die Korrelationsfunktion im ursprünglichen Ising–Modell zu finden.

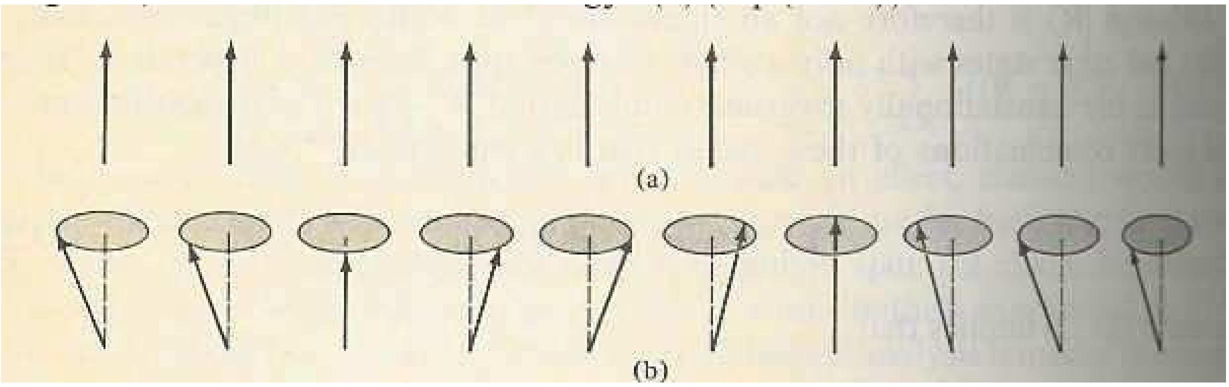
$$G(i, i+j) = (\tanh(\beta J))^j.$$

Diskutieren Sie den Abfall von G als Funktion von j.

30. **Spinwellen (II) (6 Punkte)**
In Aufgabe 14 wurden einige Eigenschaften des Grundzustandes und niedriger angeregter Zustände der eindimensionalen Heisenbergspinkette berechnet. Die angeregten Zustände wurden als Spinwellen bezeichnet, und sollen in dieser Aufgabe durch ihre Korrelationsfunktionen charakterisiert werden. Der Hamiltonoperator lautet:

$$H = -A \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{n+1}$$

Figur 1 skizziert den Grundzustand (alle Spins zeigen nach oben), und einen (angeregten) Spinwellenzustand.



a) Sei $|\psi_n\rangle$ der Zustand, in dem Spin n nach unten zeigt, und

$$|\psi_k\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle$$

der Spinwellenzustand mit Wellenvektor k; siehe Aufgabe 14 (c-d). Bestimmen Sie die mittlere Magnetisierung der Spins, $\langle \boldsymbol{\sigma}_m \rangle$, in diesen Zuständen.

b) Die 'transversale Spinkorrelationsfunktion' sei definiert durch:

$$C_{nm} = \langle \psi_k | \boldsymbol{\sigma}_\perp^n \cdot \boldsymbol{\sigma}_\perp^m | \psi_k \rangle = \langle \psi_k | \sigma_x^n \sigma_x^m + \sigma_y^n \sigma_y^m | \psi_k \rangle.$$

Zeigen Sie, dass diese Korrelationsfunktion mit dem Abstand $(n-m)$ abfällt gemäß:

$$\frac{2J}{N} \cos(ka(n-m)),$$

wobei a der Gitterabstand ist.

31. **Fluktuations–Dissipations Theorem (6 Punkte)**
In Aufgabe 9 wurde die folgende Operatoridentität gezeigt:

$$\frac{d}{d\lambda} \exp(A(\lambda)) = \int_0^1 dx \exp(xA(\lambda)) \frac{dA}{d\lambda} \exp((1-x)A(\lambda)),$$

welche für einen beliebigen Operator $A(\lambda)$ gilt, der von einem Parameter λ abhängt.

a) Zeigen Sie, dass obige Beziehung äquivalent ist zu:

$$\frac{d}{d\lambda}e^{-\beta H_\lambda(t)} = -\int_0^\beta d\xi \, \left(\frac{d}{d\lambda}H_\lambda(i\hbar\xi)\right) \, e^{-\beta H_\lambda},$$

wobei die Zeitentwicklung eines Operators im Heisenbergbild Verwendung findet:

$$\frac{\partial H_\lambda}{\partial\lambda}(t) = e^{iH_\lambda t/\hbar}\left(\frac{\partial H_\lambda}{\partial\lambda}\right)_{\lambda=0} e^{-iH_\lambda t/\hbar}$$

b) Zeigen Sie mit der Relation von (a) und der Definition der Zustandssumme, $Z(\lambda) = Sp\, e^{-\beta H_\lambda}$, dass gilt:

$$\frac{d}{d\lambda}\left(-\frac{1}{\beta}\ln(Z(\lambda))\right) = \langle\frac{\partial H_\lambda}{\partial\lambda}\rangle.$$

c) Mit den Abkürzungen, $A_\lambda \equiv \frac{\partial H_\lambda}{\partial\lambda}$ und $A \equiv A_{\lambda=0} = \left(\frac{\partial H_\lambda}{\partial\lambda}\right)_{\lambda=0}$, erhält man hieraus auch:

$$\frac{d^2}{d\lambda^2}\left(-\frac{1}{\beta}\ln(Z(\lambda))\right) = \int_0^\beta d\xi \, \langle\delta A \, A_\lambda(i\hbar\xi)\rangle,$$

d) Vereinfachen Sie obige Ergebnisse für den Fall, dass der Hamiltonoperator linear vom Parameter λ abhängt, $H_\lambda = H_0 - \lambda A$. Man definiert dann die Suszeptibilität:

$$\chi_A(\lambda) == \frac{d\langle A\rangle}{d\lambda} = \frac{d^2}{d\lambda^2}\left(-\frac{1}{\beta}\ln(Z(\lambda))\right) = \int_0^\beta d\xi \, \langle\delta A \, \delta A(i\hbar\xi)\rangle$$

Zeigen Sie, dass im klassischen Grenzfall oder falls $[A, H_\lambda] = 0$, gilt

$$\chi_A(\lambda) = \frac{1}{k_B T}\langle\delta A \, \delta A\rangle.$$