



**Übungen zur Statistischen Mechanik  
 Wintersemester 2007/08**

**Übungsblatt 12**, Ausgabe 22.01.2008, abzugeben bis 28.01.2008

**Präsenzaufgaben**

**62. Van der Waals Gas**

Das Modell des idealen Gases vernachlässigt Wechselwirkungen zwischen den Gas-Teilchen. Eine Möglichkeit, diese Näherungsweise zu berücksichtigen, ist das Van der Waals Modell. Mit diesem lässt sich auch der Gas-Flüssigkeits-Phasenübergang beschreiben.

- (a) Betrachten Sie zunächst die Freie Energie,

$$F(T, V, N) = -\frac{N^2 a}{V} - N k_B T \ln \left( \frac{V - Nb}{N \lambda^3} \right),$$

und leiten Sie daraus eine neue Zustandsgleichung her,

$$P = \frac{N k_B T}{V - Nb} - \frac{N^2 a}{V^2}.$$

Diese Zustandsgleichung ist nach dem Niederländer Johannes Diderik van der Waals benannt. Diskutieren Sie die Rolle der — im Unterschied zur Zustandsgleichung des idealen Gases — neu eingeführten Parameter.

- (b) Skizzieren Sie die Isothermen im  $PV$  Diagramm. Was fällt Ihnen auf? Was bedeutet das für die Kompressibilität  $\kappa_T$ ?
- (c) Die Temperatur, bei der die Isotherme einen Sattelpunkt, den kritischen Punkt, besitzt, nennt man kritische Temperatur  $T_c$ . Für  $T > T_c$  gibt es keinen Phasenübergang. Druck und Volumen am kritischen Punkt werden kritischer Druck  $P_c$  beziehungsweise kritisches Volumen  $V_c$  genannt. Bestimmen Sie  $T_c$ ,  $P_c$  und  $V_c$ .

Zeigen Sie die parameterfreie Darstellung der Zustandsgleichung,

$$p = \frac{8t}{3v - 1} - \frac{3}{v^2}.$$

Wobei  $p \equiv \frac{P}{P_c}$ ,  $t \equiv \frac{T}{T_c}$  und  $v \equiv \frac{V}{V_c}$ .

- (d) Nun wollen wir die „richtigen“ Isothermen im  $PV$  Diagramm zeichnen. Was gilt für den Druck und das chemische Potential der koexistierenden Phasen? Berechnen Sie das chemische Potential über die freie Enthalpie  $G = \mu N = F + PV$  und drücken Sie  $F$  durch  $F = -\int_0^V P(V) dV$  aus. Leiten Sie damit die Maxwell-Konstruktion

$$\int_{v_{fl}}^{v_g} p(v) dv = p_{fl/g}(v_g - v_{fl})$$

her.  $p_{fl/g}$  ist der Druck bei Koexistenz,  $v_{fl}$  und  $v_g$  sind die reduzierten Volumina der flüssigen und der gasförmigen Phase. Skizzieren Sie nun die realen Isotherme im  $PV$ -Diagramm und mit dessen Hilfe die Verdampfungskurve im  $PT$ -Diagramm.

- (e) Zeichnen Sie in Ihr  $PV$ -Diagramm noch die sogenannte Binodale ein, die den Koexistenzbereich von der vollständig flüssigen und der vollständig gasförmigen Phase trennt.
- (f) Wir möchten nun die Binodale in der Nähe des kritischen Punktes untersuchen, d.h. wir möchten den Zusammenhang zwischen  $\Delta p = p - 1$ ,  $\Delta t = t - 1$  und  $\Delta v = v - 1$  in führender Ordnung herleiten. Auf der Binodalen gilt

$$\Delta v_g = -\Delta v_{fl} = \sqrt{4(-\Delta t)} + \mathcal{O}(\Delta t).$$

Entwickeln Sie  $p(t, v)$  in  $\Delta t$  und  $\Delta v$  bis zur Ordnung  $(\Delta t)^{(3/2)}$ . Wie lautet der Zusammenhang zwischen  $\Delta p$  und  $\Delta t$  in führender Ordnung auf der Binodalen?

### schriftlich

#### 63. Spinwellen (Magnonen) (6 Punkte)

Betrachten Sie eine eindimensionale Kette von  $N$  Spins, welche zur Vereinfachung zu einem Ring geschlossen sein soll (periodische Randbedingung). Ein Mikrozustand dieser Spinkette könnte z.B. lauten:  $|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ . Wenn nur Nächstnachbarwechselwirkungen auftreten lautet der Hamiltonoperator:

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

- (a) Die niedrigsten Eigenwerte dieses Hamiltonoperators können leicht gefunden werden indem  $H$  mit dem Spinaustauschoperator geschrieben wird:

$$p_{n,n+1} = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{n+1}).$$

Betrachten Sie die Wirkung von  $p_{n,n+1}$  auf einen beliebigen Zustand.

*Hinweis* Zeigen Sie zuerst, dass die Spins mit  $n' \neq n, n + 1$  nicht verändert werden.

Zeigen Sie dann, dass die beiden Spins  $n$  und  $n + 1$  gedreht werden.

Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator geschrieben werden kann als:

$$H = N J - 2 J \sum_{n=1}^N p_{n,n+1}.$$

- (b) Wenn  $J > 0$  ist, weist das System ferromagnetische Wechselwirkungen auf, welche benachbarte Spins parallel anordnen möchten. Bestimmen Sie damit den Grundzustand des Systems. (Wieviele verschiedene gibt es? Wählen Sie einen davon.) Berechnen Sie den Energiewertungswert  $\langle H \rangle$  (Grundzustandsenergie) in diesem Zustand.
- (c) Wir interessieren uns nun für die ersten angeregten Zustände. Es bietet sich an, die Energie von der Grundzustandsenergie aus zu messen:  $H_* = H + N J$ . Mit der Vermutung, dass im ersten angeregten Zustand alle Spins in dieselbe Richtung weisen bis auf einen, definieren wir  $|\psi_n\rangle$ , als den Zustand, in dem der  $n$ -te Spin gedreht ist. Mit der Annahme, dass die gesuchten angeregten Zustände, mit niedrigen Anregungsenergien geschrieben werden können als:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N a_n |\psi_n\rangle$$

sollen die Eigenwerte  $\varepsilon_l$  von  $H_*$  bestimmt werden. Zeigen Sie, dass diese folgende Gleichungen erfüllen:

$$\varepsilon_l a_n = -2 J (a_{n+1} + a_{n-1} - 2a_n).$$

Schreiben Sie  $a_n = \exp(in\delta)$  und verwenden Sie die periodische Randbedingung ( $a_{N+1} = a_1$ ), um zu zeigen:

$$\varepsilon_l = 8J \sin^2\left(\frac{\pi l}{N}\right),$$

für ganzzahlige  $l$ .

- (d) Ein Wellenvektor kann durch Einführung eines Gitterabstandes  $a$  zwischen den Spins definiert werden über:  $k = (2\pi l)/(Na)$ . Leiten Sie hiermit die Dispersionsrelation der Spinwellen ab:

$$\varepsilon_k = 4J (1 - \cos(ka))$$

und diskutieren Sie den Grenzfall  $k \rightarrow 0$ . Die Koeffizienten  $a_n$  beschreiben die Amplituden der Spinwellen, die auch Magnonen heißen.

- (e) Die Verallgemeinerung der eindimensionalen Spinkette auf einen dreidimensionalen ferromagnetischen Würfel führt für kleine Beträge des Wellenvektors  $k = |\mathbf{k}|$  zu einer Dispersionsrelation

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \tilde{J} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})^2$$

wobei der Vektor  $\mathbf{a}$  mit den Gitterkonstanten des Kristalls verknüpft ist. Leiten Sie, indem Sie die Spinwellen als nichterhaltene ideale (Quasi-) Bosonen (genannt 'Magnonen') behandeln, die Abhängigkeit der Gesamtmagnetisierung  $\mathbf{M}(T)$  von der Temperatur im Grenzfall  $T \rightarrow 0$  ab (Blochsches Gesetz).

*Hinweis:* Während der Ferromagnet bei  $T = 0$  im vollständig geordneten Grundzustand liegt (mit  $\mathbf{M} = M\hat{\mathbf{z}}$ ), erniedrigt jede Spinwelle die Magnetisierung um ein magnetisches Moment.

#### 64. 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  $G(i, j) = \langle \Delta S_i \Delta S_j \rangle$  mit  $\Delta S_i = S_i - \langle S_i \rangle$  woraus  $G(i, j) = \langle S_i \cdot S_j \rangle$  folgt, weil  $\langle S_i \rangle = 0$ .

- (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 28 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  $j$ .

65. **Ising-Modell mit unendlich reichweitiger Wechselwirkung (6 Punkte)**

Betrachten Sie  $N$  Ising-Spins mit folgendem Hamilton-Operator:

$$\mathcal{H} = -H \sum_{i=1}^N S_i - \frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N S_i S_j.$$

Hier wechselwirken die Spins mit dem äusseren Magnetfeld  $H$  sowie alle untereinander mit gleicher Kopplungsstärke  $J/2N$ . Warum skaliert die Kopplungskonstante mit  $1/N$  ?

- a) Es ist sinnvoll, den Hamilton-Operator mittels des Gesamtmoments  $M = \sum_{i=1}^N S_i$  umzuschreiben. Für die Zustandssumme  $Z = \sum_{\{S_i\}} \exp -\beta \mathcal{H}$  lässt sich dann ein geschlossener Ausdruck finden mit Hilfe der sogenannten *Hubbard-Stratonovich Transformation*. Diese besteht darin, die folgende Identität auszunutzen:

$$e^{\frac{\beta J}{2N} M^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{\sqrt{2\pi/N\beta J}} e^{-\frac{N\beta J}{2} \mu^2 + \beta J \mu M}.$$

Somit ersetzt man die Wechselwirkung der Spins *untereinander* durch die Wechselwirkung mit dem *effektiven mittleren Feld*  $\mu$ . Da die Spins nun "entkoppelt" sind, kann man genauso vorgehen wie im Fall von unabhängigen Spins im Magnetfeld. Das Ergebnis lautet:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{\sqrt{2\pi/N\beta J}} e^{-\beta N \mathcal{L}(\beta, H, \mu)}$$

wobei

$$\mathcal{L}(\beta, H, \mu) = \frac{J}{2} \mu^2 - \frac{1}{\beta} \ln \{2 \cosh \beta(H + J\mu)\}$$

- b) Im thermodynamischen Limes ( $N \rightarrow \infty$ ) kann man  $Z$  mit Hilfe der Sattelpunktmethode exakt bestimmen. Man bekommt:

$$Z = \sum_i e^{-\beta N \mathcal{L}(\mu_i)},$$

wobei  $\mu_i$  die Minima von  $\mathcal{L}$  sind. Zeigen Sie, dass sich für die Extrema die folgende Gleichung ergibt:

$$\mu = \tanh \beta(H + J\mu).$$

Zeigen Sie nun, indem Sie  $Z$  nach  $H$  ableiten, dass für das mittlere magnetische Moment pro Spin  $m = \langle M \rangle / N$  gilt:

$$m = \frac{1}{Z} \sum_i \mu_i e^{-\beta N \mathcal{L}(\mu_i)}.$$

Machen Sie sich klar, dass für  $N \rightarrow \infty$  nur das globale Minimum  $\mu_0$  von  $\mathcal{L}$  zu  $m$  beiträgt, so dass  $m = \mu_0$  gilt. Berechnen Sie die zweite Ableitung von  $\mathcal{L}$  nach  $\mu$  und diskutieren Sie den Verlauf von  $\mathcal{L}$  als Funktion von  $\mu$  in Abhängigkeit von der Temperatur und Magnetfeld. Was folgt daraus für die Magnetisierung ?

Hinweis:  $\frac{d}{dx} \tanh x = 1 / \cosh^2 x$