Institut für Physik

Friederike Schmid

WS 2017/2018

Übungen zur Vorlesung Theorie IV (Statistische Physik und Thermodynamik)

Blatt 9

Aufgaben (abzugeben bis spätestens 12:10 am 09. Januar)
Abgabe: Einwurf in den roten Kasten Nr. 34 im Erdgeschoss des Physik-Gebäudes (Staudingerweg 7)

Aufgabe 25) Entropische Kräfte II: Gummielastizität (12 Punkte)

Betrachten Sie eine Kette von $N + 1$ Massenpunkten, die durch N masselose Glieder der (annähernd) festen Länge l verbunden sind. Die Massenpunkte und Zwischenglieder können sich beliebig überlappen und die Orientierungen verschiedener Glieder sind demnach statistisch unabhängig voneinander. Der Abstand vom Anfang zum Ende der Kette beträgt $\vec{R} = \sum_{i=1}^{N} \vec{l}_i$ (mit $|\vec{l}_i| = l \; \forall \, i$).

(a) Berechnen Sie die Erwartungswerte $\langle \vec{R} \rangle$, $\langle \vec{R}^2 \rangle$, $\langle R_\alpha R_\beta \rangle$ mit $\alpha, \beta = x, y, z$.

(b) Berechnen Sie mit Hilfe des zentralen Grenzwertsatzes für große N die Verteilung $P(\vec{R})$.

(c) Nehmen Sie nun an, dass auf die Enden der Kette eine Kraft $\vec{F}$ wirkt, d.h. es gibt einen Energiebeitrag $E_F = -\vec{F} \cdot \vec{R}$. Berechnen Sie die Zustandssumme der Kette $\mathcal{Z}(\vec{F}, T)$ als Funktion von $\vec{F}$ und der Temperatur T mit Hilfe des Ergebnisses von (b).
Hinweis: Wenn Sie (b) nicht lösen konnten, dann rechnen Sie mit $P(\vec{R}) = \text{const} \cdot \exp(-\frac{1}{2\sigma^2} \vec{R}^2)$.

(d) Bestimmen Sie aus $\mathcal{Z}(\vec{R}, T)$ die freie Energie $G(\vec{F}, T) = -k_B T \ln \mathcal{Z}$ und den mittleren Abstand $\langle \vec{R} \rangle$ als Funktion von $\vec{F}$ und der Temperatur T.
Hinweis: Zeigen Sie zunächst $\langle R_\alpha \rangle = -\partial G / \partial F_\alpha$.

(e) Wie verhält sich die Länge der Kette, wenn man bei gleichbleibender Kraft die Temperatur erhöht? Diskutieren Sie Ihren Befund.

Aufgabe 26) Isingmodell I (12 Punkte)

Das Isingmodell ist ein wichtiges Modellsystem bei der theoretischen Untersuchung von Phasenübergängen. Man betrachtet N "Spins" σ_i, die den Wert $\sigma_i = \pm 1$ annehmen können. Die potentielle Energie E hängt von den Spinkonfigurationen $\mathcal{C} = \{\sigma_1, \cdots, \sigma_N\}$ ab. Kinetische Freiheitsgrade gibt es nicht. Die "Ordnung" des Systems wird über den "Ordnungsparameter" $M = \sum_i \sigma_i$ quantifiziert.

Analog zu Kapitel 2.4. kann man verschiedene Gesamtheiten definieren. In der kanonischen Gesamtheit sind die Konfigurationen z.B. gemäß $P[\mathcal{C}] = \mathcal{Z}^{-1} \, \mathrm{e}^{-E[\mathcal{C}]/k_B T}$. verteilt.

Betrachten Sie hier ein Isingmodell mit der Energie $E = -J \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$, wobei der Parameter J die Wechselwirkung zwischen Spins quantifiziert, und H ein auf die Spins wirkendes Feld ist. In dieser Variante des Modells kommuniziert also jeder Spin gleichberechtigt mit jedem anderen Spin.

(a) In der kanonischen Gesamtheit ist der Ordnungsparameter gemäß einer Verteilung $P(M) = \mathcal{Z}^{-1} \exp[-\frac{1}{k_B T} \hat{F}(M)]$ verteilt. Berechnen Sie $\hat{F}(M)$ unter Zuhilfenahme der Stirling-Formel.

Das Ergebnis hat die Form $\hat{F}(M) = N\, f(m)$ mit $m = M/N$ und

$$f(m) = \text{const} + \frac{k_B T}{2}[(1-m)\ln(1-m) + (1+m)\ln(1+m)] - \frac{1}{2}Jm^2 - Hm \tag{1}$$

<u>Hinweis:</u> Berechnen Sie vorab die Anzahl $\mathcal{N}(M)$ der Konfigurationen mit Ordnungsparameter M.

(b) Berechnen und skizzieren Sie $f(m)$ aus (1) für $J = 1, k_B T = 0.5$ und $H = 0, \pm 0.01$. Skizzieren Sie dann $P(M) \propto \exp(-Nf(m)/k_B T)$ für dieselben Parameterwerte und $N = 10, 50, 100$. Was fällt Ihnen auf?

Auf Basis Ihrer Beobachtung sollten Sie nun erkennen, wie man in der kanonischen Gesamtheit im Grenzfall $N \to \infty$ die Ordnungsparameterdichte m für gegebene Parameter T, J, H berechnet. Bestimmen Sie $m(H)$ für $k_B T = 1, J = 0.5$.

(c) Skizzieren Sie $f(m)$ für $J = 1, H = 0$ und $k_B T = 0.5, 1, 1.5$. Was sehen Sie?

Es gibt einen Phasenübergang bei einer kritischen Temperatur T_c. Berechnen Sie T_c und diskutieren Sie das Verhalten von $m(T, H \to 0^+)$ als Funktion von T in der Nähe von T_c.

Aufgabe 27) <u>Eindimensionale Isingkette</u> (12 Punkte)

Wir betrachten dasselbe Modell wie in Aufgabe 26. Allerdings sind die Spins jetzt auf einem Ring angeordnet und kommunizieren nur mit ihren direkten Nachbarn. Die Energie dieser eindimensionalen Isingkette im Feld H ist $E = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} - H\sum_i \sigma_i$.

Berechnen Sie den Ordnungsparameter $\langle M\rangle = \langle\sum_i \sigma_i\rangle$ einer geschlossenen Isingkette von N Spins ($\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1$). Gehen Sie folgendermaßen vor:

(a) Zeigen Sie allgemein: Mit $F(T,H) = -k_B T \ln \mathcal{Z}$ gilt $\langle M\rangle = -(\partial F/\partial H)_T$. Hier ist $\mathcal{Z}$ die Zustandssumme, $\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1=\pm1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm1} e^{-\beta E(\sigma_1,\cdots,\sigma_N)}$.

(b) Definieren Sie die 2×2-Matrix

$$A = \begin{pmatrix} \exp(\beta(J+H)) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta(J-H)) \end{pmatrix}$$

und beweisen Sie $\mathcal{Z} = \text{Spur}(A^N)$.

(c) Berechnen Sie $\mathcal{Z}$ und $F(H)$ im Grenzwert sehr großer N.

(d) Berechnen Sie den $\langle M\rangle$ als Funktion von T und H aus $F(H,T)$ mit Hilfe von (a). Betrachten Sie den Fall $H \to 0$. Hat das System einen Phasenübergang?

Aufgabe E) (2 Sonderpunkte)

Stellen Sie *auf einem separaten Blatt* drei Fragen zum bisherigen Inhalt der Vorlesung. Sie können die Fragen auch anonym stellen, dann gibt es halt keine Sonderpunkte. Ich werde sie in der Vorlesung besprechen.