M.-A. Lawn http://www.th.physik.uni-bonn.de/th/groups/kroha/teaching/StatMech_SS05/

Übungsblatt 12

Besprechung: 4. Juli - 8. Juli

12.1 Isingmodell unendlich langreichweitiger Wechselwirkung

Wir betrachten das ferromagnetische Ising-Modell mit unendlich langreichweitiger Wechselwirkung im Magnetfeld B:

$$H = -\frac{J}{N}\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j - \mu B\sum_i \sigma_i, \;\; J > 0.$$

Die Spins sind auf einem $d = 3$-dimensionalen kubischen Gitter angeordnet. σ_i bezeichnet die $z-$Komponente des Spins am Gitterplatz i und kann die Werte $\pm\frac{1}{2}$ annehmen. Es wird über alle N Gitterplätze i, j summiert.

1) „Mean-field-Näherung“: Die Wechselwirkung eines Spins σ_i mit den nächsten Nachbarn wird durch das (noch zu bestimmende) mittlere Feld $\langle\sigma\rangle$ der anderen Spins ersetzt:

   $$H_{i,MF} = -(2dJ\langle\sigma\rangle + \mu B)\sigma_i.$$

   Berechnen Sie in dieser Näherung die Zustandssumme und daraus den mittleren Spins $\langle\sigma\rangle$ pro Gitterplatz. Diskutieren Sie die so erhaltene *Selbstkonsistenz-Gleichung* für $\langle\sigma\rangle$ graphisch für $B = 0$. Was ergibt sich daraus für die kritische Temperatur T_c, bei der ein Phasenübergang vom paramagnetischen ($\langle\sigma\rangle = 0$) zum ferromagnetischen Zustand mit spontaner Magnetisierung ($\langle\sigma\rangle \neq 0,\; B = 0$) auftritt?

2) Zeigen Sie, daß bei unendlich langreichweitiger Wechselwirkung die Mean-Field-Näherung exakt wird. Verwenden Sie dazu, was Sie allgemein über das Verhalten der Fluktuationen im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ wissen.

3) Bestimmen Sie für $T < T_c$ den Ordnungsparameter $\langle\sigma\rangle(\tau)$ als Funktion der reduzierten Temperatur $\tau = (T_c - T)/T_c$ in der Nähe des Übergangspunktes ($\tau \simeq 0$), indem Sie die Selbstkonsistenzgleichung bezüglich kleiner Ordnungsparameter entwickeln.

4) Berechnen Sie die magnetische Suszeptibilität χ als Funktion der Temperatur bei $B = 0$ (implizite Differentiation).

5) Skizzieren Sie $\langle\sigma\rangle$ und χ im gesamten Temperaturbereich.

12.2 Thermodynamische Störungstheorie: Der anharmonische Oszillator

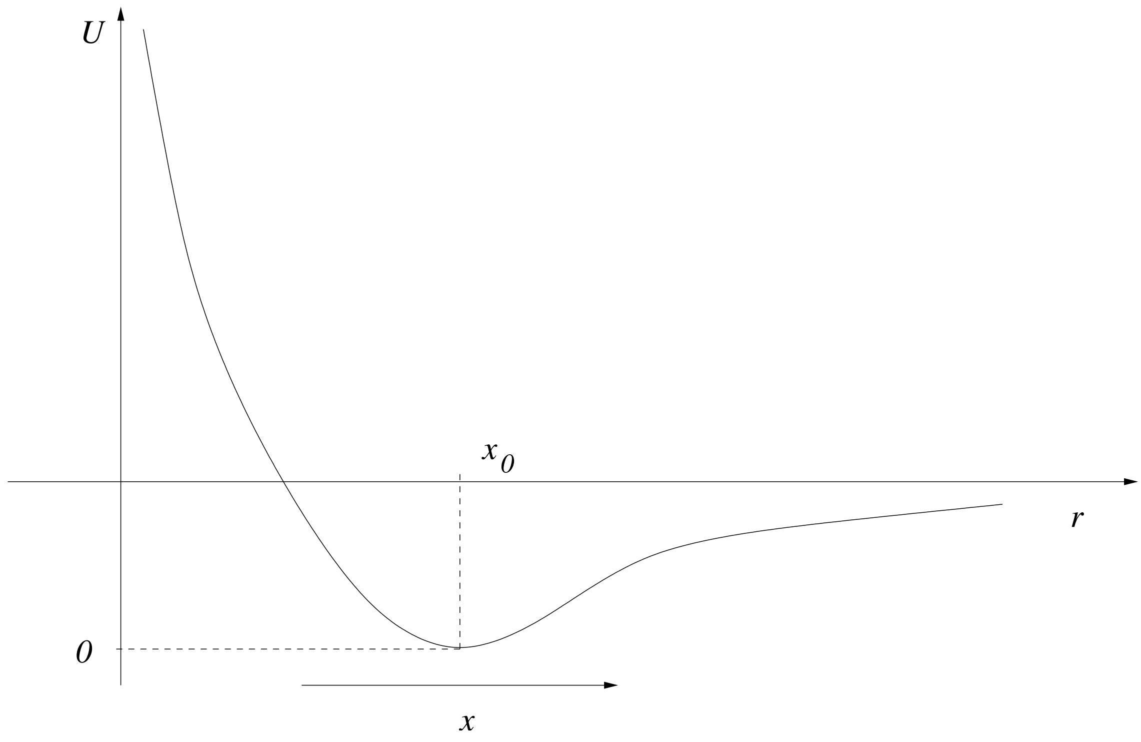
In einem zweiatomigen Molekül seien die Atome durch das gezeigte Potential U aneinander gebunden (siehe Zeichnung), wobei r den Abstand der Atome bezeichne. Außerdem sei das Molekül in ein Kristallgitter eingebunden, so daß keine Rotationsfreiheitsgrade auftreten. Für kleine Auslenkungen x aus der Ruhelage x_0 kann U um x_0 entwickelt werden. Dann wird das Molekül durch den folgenden Hamilton-Operator beschrieben:

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega_0^2 x^2 + \alpha x^3,$$

mit M der effektiven Masse, ω_0 der Eigenfrequenz. Betrachten Sie den kubischen Term als kleine Störung. Der Ortsoperator x kann durch die Auf- und Absteigeoperatoren a^+, a ausgedrückt werden.

1) Geben Sie die Zustandssumme Z_0 und die freie Energie F_0 des ungestörten Systems an.

2) Bestimmen Sie die Korrektur zur freien Energie bis zu zweiter Ordnung Störungstheorie in α. Es sollen nur tiefe Temperaturen betrachtet werden, d. h. bei der Auswertung brauchen nur die beiden führenden Ordnungen in $\exp(-\hbar\omega_0/k_B T)$ berücksichtigt zu werden. Berechnen Sie dann den mittleren Abstand $(x_0 + \langle x \rangle)$ der Atome in erster Ordnung Störungstheorie sowie den thermischen Ausdehnungskoeffizienten $\kappa = \frac{1}{x_0}(\partial\langle x\rangle/\partial T)$. Die Wärmeausdehnung eines Festkörpers kann so mikroskopisch erklärt werden.



Viel Spaß!