Übungen zu Statistische Physik I, SoSe 08

Prof. Dr. R. Friedrich

Übungen im WWW: http://pauli.uni-muenster.de/tp/

Übungsblatt 8: (17 P.) **Abgabe: 26.06.08**

Aufgabe 1: Ising-Modell für Ferromagnete (mündlich)

Ein einfaches Modell für Strukturbildungsprozesse in Ferromagneten stellt das „Ising-Modell“ dar, bei dem nur benachbarte Spins miteinander wechselwirken und das in einer und in zwei Dimensionen exakt lösbar ist. Wir wollen hier speziell das eindimensionale Modell betrachten.

Für ein eindimensionales System aus N Spins mit periodischen Randbedingungen laute der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \left(J\hat{s}_i\hat{s}_{i+1} + h\hat{s}_i \right) \quad , \tag{1}$$

wobei die Konstanten J und h die Wechselwirkung der Spins bzw. den Einfluss eines äußeren Magnetfeldes bestimmen. Eine Basis des Hilbertraumes sei durch

$$|s_1 \dots s_N\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{s}_i\,|s_1 \dots s_N\rangle = s_i\,|s_1 \dots s_N\rangle \tag{2}$$

gegeben, wobei jeweils nur die Eigenwerte $s_i = \pm 1$ auftreten. Aufgrund der Periodizität gilt $\hat{s}_{N+1} := \hat{s}_1$.

a) **[1P.]** Geben Sie die kanonische Zustandssumme an.

b) **[2P.]** Nach geeigneter Sortierung besteht die Zustandssumme aus einer Summe von Produkten, deren Faktoren die Form $e^{\beta\left(Js_is_{i+1}+h\frac{s_i+s_{i+1}}{2}\right)}$ haben. Welche Werte können diese Faktoren annehmen? Zeigen Sie für $N = 2$, dass sich die Zustandssumme berechnen lässt als

$$Z(\beta) = \mathrm{Sp}\left(P^N\right) \quad \text{mit} \quad P = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} \quad . \tag{3}$$

Dieser Zusammenhang gilt auch für $N > 2$. Können Sie das zeigen?

Hinweis: Die Spur eine Matrix ergibt sich als die Summe der Diagonalelemente.

c) **[3P.]** Sie haben auf Zettel 5 gezeigt, dass die Spur nicht von der gewählten Basis abhängt und sich in der Eigenbasis besonders einfach berechnen lässt. Bestimmen Sie die Eigenwerte der Matrix P und verwenden Sie diese, um den Ausdruck $\mathrm{Sp}\left(P^N\right)$ zu berechnen. Wie lautet die Zustandssumme im thermodynamischen Limes, d.h. für $N \gg 1$?

Hinweis: Die Bestimmung der Eigen*vektoren* ist zur Berechnung der Spur nicht notwendig.

Kontrolle: Bestenfalls sollten Sie im thermodynamischen Limes

$$Z(\beta) = e^{N\beta J}\left(\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}\right)^N \tag{4}$$

erhalten.

d) **[1P.]** Berechnen im thermodynamischen Limes Sie die freie Energie $F(\beta, h)$ und die Magnetisierung $m := \frac{1}{N}\langle\sum_{i=1}^{N} s_i\rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial F}{\partial h}$. Finden Sie eine kritische Temperatur, unterhalb derer selbst ohne äußeres Feld (d.h. $h = 0$) eine nicht-verschwindende Magnetisierung auftritt?

Aufgabe 2: Zustandsgleichung realer Gase (schriftlich)

Bei idealen Gasen werden keine realistischen Wechselwirkungen der Gasteilchen berücksichtigt. Das führt dazu, dass real auftretende Phänomene, wie z.B. Phasenübergänge, von dieser Idealisierung nicht erfasst werden. Im Folgenden werden, ausgehend von den mikroskopischen Hamiltongleichungen, einige Eigenschaften realer Gase untersucht.

Reale Gase lassen sich untersuchen, wenn die Wechselwirkungen $V_{12}(\boldsymbol{q_i}, \boldsymbol{q_j})$ sämtlicher Teilchen berücksichtigt werden.

a) **[2P.]** Geben Sie die Hamiltonfunktion für ein solches Gas an. Zeigen Sie, dass sich die freie Energie eines N-teiligen Gases ergibt als

$$F(T) = F_{\mathrm{id}} - k_B T \ln\left(\frac{1}{V^N}\int d^3\boldsymbol{q}_1 \ldots \int d^3\boldsymbol{q}_N \left(e^{-\beta\sum\limits_{i<j} V_{12}(\boldsymbol{q_i},\boldsymbol{q_j})} - 1\right) + 1\right) \quad . \tag{5}$$

Dabei stellt F_{id} die freie Energie des idealen Gases dar.

b) **[2P.]** Bei einem ausreichend verdünnten Gas muss zu einem festen Zeitpunkt nur die Wechselwirkung *zweier* Teilchen betrachtet werden. Für hinreichend große N kann man deshalb mit kombinatorischen Argumenten

$$\int d^3\boldsymbol{q}_1 \ldots \int d^3\boldsymbol{q}_N \left(e^{-\beta\sum\limits_{i<j} V_{12}(\boldsymbol{q_i},\boldsymbol{q_j})} - 1\right) \approx \frac{N^2}{2}\int d^3\boldsymbol{q}_1 \ldots \int d^3\boldsymbol{q}_N \left(e^{-\beta V_{12}(\boldsymbol{q_1},\boldsymbol{q_2})} - 1\right) \ll 1 \tag{6}$$

setzen. Zeigen Sie, dass sich mit geeignetem $V_{12}(\boldsymbol{r})$ für die freie Energie dann

$$F = F_{\mathrm{id}} + k_b T\frac{N^2}{V}B(T) \quad \text{mit} \quad B(T) = \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{r}\left(1 - e^{-\frac{V_{12}(\boldsymbol{r})}{k_b T}}\right) \tag{7}$$

ergibt und geben Sie die Zustandsgleichung des Gases an.

Hinweis: Wegen $\int d^3\boldsymbol{q}_1 \ldots \int d^3\boldsymbol{q}_N\,(\ldots) \ll 1$ können Sie den Logarithmus entwickeln.

c) **[3P.]** Bisher haben wir die Wechselwirkung $V_{12}(\boldsymbol{r})$ nicht näher spezifiziert. Wir wollen nun zwei verschiedene Wechselwirkungen betrachten. Berechnen Sie die Zustandsgleichung explizit für

(1) $\quad V_{12}(\boldsymbol{r}) = \frac{\alpha}{r^n},\ n > 3 \quad$ und

(2) $$V_{12}(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} \infty & r < r_0 \\ -v_0 & r_0 < r < r_1 \\ 0 & r_1 < r \end{cases} \quad .$$

Vergleichen Sie mit dem van der Waals-Gas.

Hinweis: Nutzen Sie im Falle des stückweise konstanten Potentials nach der Integration $\frac{v_0}{K_B T} \ll 1$, um den Ausdruck zu vereinfachen.

d) **[3P.]** Der Joule-Thomson Effekt bewirkt bei Druckänderung eine Temperaturänderung des Gases, die gegeben ist durch

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_V = \frac{1}{c_p}\left[T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p - V\right] \quad . \tag{8}$$

Bei realen Gasen wechselt diese Funktion am sogenannten Inversionspunkt ihr Vorzeichen. Wie man leicht abliest ist dieser gegeben durch

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_p = \frac{T}{V} \quad . \tag{9}$$

Zeigen Sie, dass im Falle eines van der Waals-Gases für die Inversionstemperatur in Abhängigkeit des Druckes gilt:

$$T_{\mathrm{inv}} = \frac{2a}{9b}\left(2 \pm \sqrt{1 - 3b^2 p/a}\right)^2 \quad . \tag{10}$$

Diskutieren Sie das Ergebnis und machen Sie sich mögliche technische Anwendungen des Joule-Thomson-Effektes klar.