Institut für Theoretische Physik
JLU Gießen
C. Fischer, G. Eichmann, C. Popovici

Blatt 12
WiSe 2011/12
2.2.2012

Übungen zur Statistischen Thermodynamik

Aufgabe 32: Phononen

Ein Kochsalzkristall formt ein kubisches Gitter mit N Natrium- und N Chlor-Atomen. Wegen der verschiedenen Atomsorten können nicht nur akustische, sondern auch *optische* Gitterschwingungen angeregt werden. Beschränkt man sich auf die $3N$ akustischen Eigenschwingungen, kann man mit dem Debye-Modell arbeiten, in dem die Dispersionsrelationen als linear genähert werden: $\omega_{k,\lambda}^{\text{akust.}} \approx c|\boldsymbol{k}|$; dabei soll die Schallgeschwindigkeit c für alle drei Polarisationsrichtungen $\lambda = 1, 2, 3$ dieselbe sein. Für die $3N$ höherfrequenten optischen Schwingungsmoden bietet sich das Einstein-Modell mit $\omega_{k,\lambda}^{\text{opt.}} \approx \textit{const.}$ an. Die gesamte Zustandsdichte pro Freiheitsgrad lautet dann

$$g(\omega) = g_D(\omega) + g_E(\omega) = \frac{3\omega^2}{\omega_D^3}\,\theta(\omega_D - \omega) + c\,\delta(\omega - \omega_E)\,,$$

wobei ω_E aus dem Experiment bestimmt wird.

(a) Bestimmen Sie die Konstante c aus der Gesamtzahl der optischen Anregungen.

(b) Berechnen Sie die Energie

$$E = \sum_{k,\lambda} E_{k,\lambda} = \sum_{k,\lambda} \hbar\omega_{k,\lambda}\left(\langle n_{k,\lambda}\rangle + \frac{1}{2}\right)$$

und die spezifische Wärmekapazität des Kristalls in den Grenzfällen $T \ll T_D$ und $T \gg T_D$, wobei die Debye-Temperatur T_D mit der Debye-Frequenz über $k_B T_D = \hbar\omega_D$ verknüpft ist. Verifizieren Sie das klassische Dulong-Petit-Gesetz $C_V \to 2 \times 3Nk_B$ für große Temperaturen.

Aufgabe 33: Langreichweitiges Isingmodell

Das Isingmodell dient als einfaches statistisches Modell zur Untersuchung von Phasenübergängen. Es beschreibt ein System von N paarweise miteinander wechselwirkenden Spins S_i $(i = 1 \dots N)$ in einem äußeren Magnetfeld B, die jeweils nur zwei diskrete Werte $S_i = \pm 1$ annehmen können. Wir betrachten speziell jene Variante des Modells, in dem alle Spins unabhängig von ihrer räumlichen Anordnung gleich stark aneinander koppeln. Die Hamiltonfunktion und die Zustandssumme des Systems haben dann folgende Form:

$$H = -\frac{J}{2N}\sum_{i,j} S_i S_j - B\sum_i S_i\,, \qquad Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{S_1}\cdots\sum_{S_N} e^{-\beta H}.$$

Besprechung:
Blatt 12, Theo 5 vom Mittwoch, den 2.2.2012

Aufgabe 32

Aufgabe 33

a) $H = -\frac{J}{2N}\sum\limits_{i,j} S_i S_j - B\sum\limits_i S_i$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta(\frac{J}{2N}\sum\limits_{i,j} S_i S_j - B\sum\limits_i S_i)}$$

$$\sum_{i,j} S_i S_j = \sum_i S_i \sum_j S_j = \left(\sum_i S_i\right)^2$$

$$\Rightarrow Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta\left(\frac{J}{2N}\left(\sum\limits_i S_i\right)^2 - B\sum\limits_i S_i\right)} = \sum_{\{S_i\}} e^{\left(\sqrt{\beta\frac{J}{2N}}\sum\limits_i S_i\right)^2} \cdot e^{\beta B\sum\limits_i S_i}$$

$$= \sum_{\{S_i\}} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2+2x\left(\sqrt{\beta\frac{J}{2N}}\sum\limits_i S_i\right)} \cdot e^{\beta B\sum\limits_i S_i}\right)$$

$$e^{s^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2+2xs} \quad , \quad y = \sqrt{\frac{2}{\beta JN}}x \quad \Rightarrow \quad dx = \sqrt{\frac{\beta JN}{2}}dy$$

$$\Rightarrow Z = \underbrace{\sum_{\{S_i\}}}_{=\sum\limits_{S_1}\cdots\sum\limits_{S_N}} \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dy e^{-N\frac{\beta J}{2}y^2 + \beta Jy\sum\limits_i S_i} \cdot e^{\beta B\sum\limits_i S_i}$$

$$\sum_{\{S_i\}} e^{A\sum\limits_i S_i} = \sum_{\{S_i\}}\prod_i e^{aS_i} = \sum_{S_1}\cdots\sum_{S_N} e^{aS_1}\cdots e^{aS_N} = \sum_{S_2}\cdots\sum_{S_N}(e^a+e^{-a})e^{aS_2}\cdots e^{aS_N}$$

$$= \underbrace{(e^a+e^{-a})}_{1.}\underbrace{(e^a+e^{-a})}_{2.}\cdots\underbrace{(e^a+e^{-a})}_{N.} = (e^a+e^{-a})^N = (2\cosh(a))^N$$

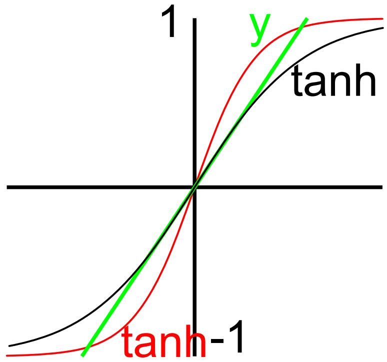
$$\Rightarrow Z = 2^N\cosh^N(a) = \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{N\beta J}{2}y^2} \cdot 2^N\cosh^N(\beta Jy\beta B)$$

$$= \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dy e^{-N(\overbrace{\frac{\beta J}{2}y^2 + \ln(2\cosh(\beta(Jy+B)))}^{f(y,\beta,B)})}$$

b) $\int\limits_0^{\infty} e^{-\lambda I(x)} = e^{-\lambda I(y_0)}\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda I''(y_0)}}$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \beta Jy - \beta J\tanh(\beta(Jy+B)) \quad , \quad d^2fy^2 = \beta J - \frac{(\beta J)^2}{\cosh^2(\beta(Jy+B))}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} \overset{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad y = \tanh(\beta(Jy+B)) \quad [B=0]$$



$$Z = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} e^{-Nf(y_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(y_0)}}$$
$$= \sqrt{\beta J} e^{-N(\frac{\beta J}{2} y_0^2 - \ln(\cosh(\beta(Jy_0+B))))} - \sqrt{\frac{1}{\beta J - (\frac{\beta J}{2\cosh(\dots)})^2}}$$
$$F = -\frac{1}{\beta}\ln(Z) = \frac{1}{\beta} N f(y_0) + \frac{1}{\beta}\ln\left(\sqrt{\frac{1}{1-\frac{\beta J}{2\cosh^2(\dots)}}}\right)$$

c) Ergebnis aus der b) ableiten.

$$M = \frac{1}{N\beta}\frac{\partial \ln(Z)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial f(y_0)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\beta}(\beta J y_0 \frac{\partial y_0}{\partial \beta} - \tanh(\beta(Jy_0+B))(\beta + \beta J \frac{\partial y_0}{\partial \beta})) = y_0$$

globales Minimum v. f:

$$\overset{B=0}{\Rightarrow} f(y) = \frac{y^2}{2(\beta J)^{-1}} - \ln(2\cosh(\frac{y}{(\beta J)^{-1}}))$$