

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: $\omega_{k,\lambda}^{\text{akust.}} \approx c|\mathbf{k}|$; 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 $\omega_{k,\lambda}^{\text{opt.}} \approx \text{const.}$ 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 $C_V \rightarrow 2 \times 3Nk_B$ 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:

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

- (a) Werten Sie die Zustandssumme Z aus. Verwenden Sie die folgende Identität (Hubbard-Stratonovich-Transformation), um die Summation über die Spins durchzuführen:

$$e^{s^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2 + 2xs}.$$

Das Ergebnis sollte lauten:

$$Z = \sqrt{\frac{N\beta J}{2\pi}} \int dy e^{-Nf(y,\beta,B)}, \quad f(y,\beta,B) = \frac{\beta J y^2}{2} - \ln [2 \cosh \beta(Jy + B)].$$

- (b) Im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$) kann der obige Ausdruck für Z mit Hilfe der Sattelpunktmethode exakt ausgewertet werden: das Integral wird von einem globalen Minimum $y = y_0$ der Funktion $f(y)$ dominiert. Wie lauten dann Z und die freie Energie F ? Lösen Sie die Bestimmungsgleichung für y_0 im Fall $B = 0$ grafisch, indem Sie beide Seiten der Gleichung als Funktion von y_0 auftragen. Wieviele Lösungen können auftreten, und wie hängt deren Anzahl von der Temperatur ab?
- (c) Zeigen Sie, dass die Magnetisierung pro Teilchen folgende Relation erfüllt:

$$M := \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle = \frac{1}{N\beta} \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial B} \right|_{\beta,N} = y_0.$$

Wie lassen sich dann die Lösungen aus (b) interpretieren? Welche davon korrespondieren zu Minima bzw. Maxima von $f(y)$? Beachten Sie, dass die benötigte Lösung ein *globales* Minimum sein muss.

- (d) Berechnen Sie die isotherme Suszeptibilität $\chi = \partial M / \partial B$. Zeigen Sie im Falle eines verschwindenden Magnetfelds, dass χ bei der kritischen Temperatur $T = T_C$ wie

$$\chi \sim |\epsilon|^{-\gamma}, \quad \epsilon := \frac{T - T_C}{T_C}$$

divergiert, und zwar für $\epsilon \rightarrow \pm 0$, d.h. wenn sich T sowohl von oben als auch von unten an T_C annähert. Skizzieren Sie χ als Funktion der reduzierten Temperatur ϵ . Welchen Wert erhalten Sie für den kritischen Exponenten γ ?