

Übungsblatt Nr. 11 zur Theorie F (Statistische Physik)

- 1 Phasenübergang 2. Ordnung:** Im Übungsblatt 10 wurde die Molekularfeldtheorie eines antiferromagnetischen Heisenberg-Modells für N Spins der Länge S gerechnet. Aus den Ergebnissen folgt das freie Energiefunktional für den Ordnungsparameter $\overline{m}$:

$$F(\overline{m}) = N \left[\frac{1}{2} z J (\overline{m})^2 - k_B T \ln(Z_1) \right], \quad Z_1 = \sum_{m=-S}^S \exp\left(\frac{z J \overline{m}}{k_B T} m\right),$$

z ist die Koordinationszahl des Gitters, J die Wechselwirkungsenergie.

- a) In der Nähe des Phasenübergangs ist $\overline{m} \simeq 0$. Zeigen Sie durch Reihenentwicklung bis zur Ordnung $\sim \overline{m}^4$, daß man für $T \simeq T_N$ ein Landau-Funktional erhält,

$$F(\overline{m}) = N z J \left[\frac{1}{2} \frac{T - T_N}{T_N} (\overline{m})^2 + \frac{1}{4} b (\overline{m})^4 - \frac{S(S+1)}{3} \ln(2S+1) \right],$$

und bestimmen Sie die Konstanten T_N und b .

- b) Skizzieren Sie $F(\overline{m})$ für $T > T_N$ und $T < T_N$, und berechnen Sie $\overline{m}(T)$.

- 2 Phasenübergang 1. Ordnung:** In einem ferroelektrischen Kristall entsteht unterhalb einer Übergangstemperatur T_c eine spontane Verzerrung γ der Einheitszelle, verbunden mit einem Dipolmoment $\mathbf{P}$. Das Landau-Funktional für die beiden Ordnungsparameter $\eta = |\mathbf{P}|^2$ und γ lautet

$$F(\eta, \gamma) = a(T - T_0) \eta + b \eta^2 + c \eta^3 + d \gamma \eta + \frac{g}{2} \gamma^2, \quad T_0, a, b, c, d, g > 0, \quad \tilde{b} = \left(\frac{d^2}{2g} - b\right) > 0$$

- a) Bestimmen Sie den Gleichgewichtswert $\gamma = \gamma(\eta)$ und damit das Funktional $F(\eta)$. Skizzieren Sie den Verlauf von $F(\eta)$ für verschiedene Temperaturen T , und begründen Sie, daß ein Phasenübergang 1. Ordnung auftreten kann.
- b) Berechnen Sie die kritische Temperatur T_c , bei der dieser Übergang stattfindet. Bestimmen Sie näherungsweise $\eta(T)$ und $\gamma(T)$ in der Nähe von T_c .
- c) Berechnen Sie die Entropie $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{T_0, a, b, \dots}$ für T unmittelbar oberhalb bzw. unterhalb T_c . Bestimmen Sie die latente Wärme $Q_l = T \Delta S$ des Phasenübergangs.

- 3 Gas harter Kugeln in einer Dimension:** N harte Kugeln der Masse m mit Radius r können sich auf der x -Achse im Intervall $[-r, L+r]$ frei bewegen, aber nicht durchdringen. Die klassische Hamiltonfunktion lautet

$$\mathcal{H}(\{p_i, x_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + V(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad V = \begin{cases} \infty & \text{falls } \exists i, j \text{ mit } |x_i - x_j| \leq 2r \\ \infty & \text{falls } \exists i \text{ mit } x_i < 0 \text{ oder } x_i > L \\ & \text{(Begrenzung durch "Volumen")} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Die x_i bezeichnen die Kugelmittelpunkte.

- a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme $Z_K^{kl}(T, L, N)$ im klassischen Grenzfall. (Das Potential V führt auf eine Einschränkung der Integrationsgrenzen in den $\int dx_i$. Die Integrale dx_i können durch geeignete Substitutionen gelöst werden.)
- b) Berechnen Sie nun die freie Energie $F(T, L, N)$ und den Druck $p = -\left(\frac{\partial F}{\partial L}\right)_{T, N}$. Wie lautet die Zustandsgleichung? (Stirling-Formel.)