

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 10

Prof. Dr. G. Schön
Dr. J. ColeBlatt 11
Besprechung 09.07.2010**1. Boltzmann-Gleichung, thermoelektrischer Effekt** (1 + 1 + 2 + 2 + 3 + 1 = 10 Punkte)

- (a) Vereinfachen Sie die Boltzmann-Gleichung

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \right] f_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (1)$$

für den stationären Fall.

Verwenden Sie die Relaxationszeitnäherung $(\partial f_{\mathbf{k}} / \partial t)_{\text{coll}} = -\delta f_{\mathbf{k}} / \tau$, wobei $\delta f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^0$ die Abweichung vom lokalen Gleichgewicht ist.

- (b) Linearisieren Sie die Gleichung in $\delta f_{\mathbf{k}}$.
- (c) Berechnen Sie $\delta f_{\mathbf{k}}$ für ortsabhängige Potentiale $\mu(\mathbf{r})$ und Temperaturen $T(\mathbf{r})$.
- (d) Berechnen Sie den elektrischen Strom und den Wärmestrom. Drücken Sie das Ergebnis durch die Tensoren

$$\left(\hat{K}_n \right)_{\alpha\beta} = 2\tau \int d\epsilon_{\mathbf{k}} \int d\Omega_{\mathbf{k}} D(\epsilon_{\mathbf{k}}) \left(\frac{-\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \mathbf{v}_{k\alpha} \mathbf{v}_{k\beta} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^n \quad (2)$$

mit $n = 0, 1, 2$ aus.

- (e) Werten Sie obige Integrale für eine isotrope Fermifläche, d.h. $(\hat{K}_n)_{\alpha\beta} = K_n \delta_{\alpha\beta}$, im Rahmen der Sommerfeldentwicklung aus. Lesen Sie die Transportkoeffizienten für die elektrische und thermische Leitfähigkeit ab.
- (f) Zeigen Sie, dass das Wiedemann-Franz-Gesetz

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \frac{k^2}{e^2} T \quad (3)$$

stimmt.

2. Monte-Carlo-Simulation per Hand

(10 Punkte)

In der Vorlesung wurde die numerische Simulation eines statistischen Ensembles durch die Monte-Carlo-Methode angesprochen. Hier sollen Sie zu deren besseren Verständnis den Metropolis-Algorithmus *per Hand* mit einem Würfel implementieren. Siehe auch die Seiten 87–88 im Vorlesungsskript bzw. das Buch *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* von K. Binder und D. W. Heermann (Springer-Verlag, Berlin, 1988).

Wir betrachten eine eindimensionale Kette von 6 Ising-Spins mit periodischen Randbedingungen (d.h., nächste Nachbarn des Spins 1 sind Spin 2 und Spin 6). Der Hamiltonoperator sei gegeben durch

$$\tilde{\mathcal{H}}(\{\sigma_i\}) \equiv \frac{\mathcal{H}}{kT} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad .$$

Um eine zufällige Anfangskonfiguration $\{\sigma_i\}_0$ zu bestimmen, legen Sie zunächst durch Münzwurf die Spinrichtung eines jeden der 6 Spins fest. Damit starten Sie nun den Metropolis-Algorithmus. Gehen Sie für $J = \frac{1}{4} \ln(2)$ und jeweils drei verschiedene Werte $h = 0.1, 0.2$ und 0.3 wie folgt vor:

- Würfeln Sie einmal. Die Augenzahl j des Würfels legt denjenigen Spin fest, für den ein bedingter Spinflip durchgeführt werden soll. Bestimmen Sie die Energieänderung ΔE der Spinkette, die sich durch Umdrehen des j^{ten} Spins ergibt.
- Würfeln Sie zum zweitenmal. Ordnen Sie der neuen Augenzahl k des Würfels die Zufallszahl $r = (k - 1) \cdot 0.2$ zu. Per Konstruktion gilt $0 \leq r \leq 1$. Falls $r < \exp\{-\Delta E\}$ ist, akzeptieren Sie die neue Konfiguration, ansonsten behalten Sie die alte (vor dem Flip des j^{ten} Spins).

Wiederholen Sie diese beiden Schritte solange, bis Sie $N = 30$ Konfigurationen generiert haben. Rechnen Sie für jede davon die Magnetisierung $\tilde{M}(\{\sigma_i\}) = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 \sigma_i$ aus und bestimmen Sie den Mittelwert $\langle \tilde{M} \rangle$ für das Ensemble der N Konfigurationen. Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse für die drei verschiedenen Werte des Magnetfeldes h mit der aus der Vorlesung bekannten exakten Lösung für die Magnetisierung. (Hinweis: ΔE hängt von der Richtung der Spins auf den Plätzen $j \pm 1$ ab. Es ist nützlich, sich eine Tabelle der 8 verschiedenen Möglichkeiten mit dazugehörigen Werten für $\exp\{-\Delta E\}$ anzulegen, in der man nur noch nachschauen muß anstatt jedesmal neu zu rechnen!) Als Lösung der Übungsaufgabe gilt die Abgabe der 3×30 generierten Konfigurationen *mit den entsprechenden Würfelerggebnissen* sowie den Werten für die Magnetisierung und die drei Ensemblemittelwerte.

ODER

2. Monte-Carlo-Simulation per Computer

(5 + 5 = 10 Punkte)

Finden Sie ein Monte-Carlo Programme (in C) für das 1-D Ising Model unter <http://www.tfp.uni-karlsruhe.de/Lehre/SS2010/ising.c>. Das Programm implementiert MC für das 1-D ferromagnetische Ising Modell mit periodischen Randbedingungen ($\sigma_1 := \sigma_{N+1}$)

$$\tilde{\mathcal{H}} = -K \sum_{n=1}^N \sigma_n \sigma_{n+1} - \mu H_z \sum_{n=1}^N \sigma_n, \quad (\sigma_n = \pm 1) \quad (4)$$

die N Spins werden durch einen N -dimensionalen Vektor (Elemente ± 1) dargestellt, mit N z.B. 100. Nach Wahl einer beliebigen Startkonfiguration werden MC-Schritte ausgeführt wie in der Vorlesung beschreiben:

1. Ein Spin wird umgedreht, ($\sigma \rightarrow -\sigma$)
2. Die neue Konfiguration wird mit Wahrscheinlichkeit 1 akzeptiert wenn $H(\sigma) - H(\sigma_{\text{neu}}) > 0$, ansonsten mit Wahrscheinlichkeit $\exp\{\beta[H(\sigma) - H(\sigma_{\text{neu}})]\}$.
3. Nach $100N$ MC-Schritten (zum Erreichen des Gleichgewichts) wird alle $5N$ MC-Schritte eine Messung durchgeführt.

Benutzen Sie das Programm (oder Ihr eigenes) und bestimmen Sie numerisch:

- (a) Die Magnetisierung als Funktion von $\mu H_z/kT$, für 10 Werte zwischen 0 und $4e^{-2K/kT}$, und vergleichen Sie es mit dem exakten Ergebnis im Skript (Kapitel 6.4).
- (b) Die spezifische Wärme c_V und Suszeptibilität χ (optional) als Funktion der Temperatur bei $H_z = 0$, und vergleichen Sie es mit dem exakten Ergebnis.

$$c_V = \frac{1}{kT^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2), \quad \chi = \frac{\mu_0^2}{kT} \left[\sum_{i,j=1}^N \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle^2 \right] \quad (5)$$

(Hinweis: Beginnen Sie bei der höchsten Temperatur; benutzen Sie deren Endkonfiguration als Anfangskonfiguration für die Rechnung bei der nächstniedrigeren Temperatur. Diese Prozedur heißt *simulated annealing* und vereinfacht das Erreichen von niedrigen Temperaturen).