Übungen zur Theoretischen Physik F SS 15

Prof. Dr. A. Mirlin
Dr. Una Karahasanovic, Dr. Ivan Protopopov

Blatt 8
Besprechung 19.06.2014

---

1. Van-der-Waals-Gas und Maxwellkonstruktion: $(10 + 10 + 10 + 10 + 10 = 50$ Punkte, mündlich)

Im Unterschied zum idealen Gas wechselwirken in einem realen Gas die Teilchen miteinander. Mit Hilfe eines idealisierten Modells kurzreichweitiger Abstoßung und langreichweitiger Anziehung zwischen den Gasteilchen ergibt sich nach Van der Waals (1873) die modifizierte Zustandsgleichung

$$\left(P + \frac{N^2 a}{V^2}\right)(V - Nb) = Nk_B T. \tag{1}$$

(a) Berechnen Sie die innere Energie U eines van-der-Waals Gases. Gehen Sie dabei von der Zustandsgleichung des van-der-Waals Gases aus. Sie können dazu annehmen, dass die Wärmekapazität C_V unabhängig von der Temperatur ist.

(b) Skizzieren Sie die Isothermen $P = P(V)$ eines durch Gl. (1) definierten Van-der-Waals-Gases. (Die Teilchenzahl sei konstant.) Zeigen Sie, dass man die Helmholtzsche Freie Energie $F(V)$ für konstante Temperatur durch ein Integral über $P(V)$ erhält, und skizzieren Sie $F(V)$ anhand der Skizze für $P(V)$ (schematisch, durch "graphische Integration") in einem weiteren Diagramm. Identifizieren Sie Bereiche, in denen $F(V)$ nicht konvex ist.

(c) In diesen Bereichen bezeichnet Gl. (1) thermodynamisch instabile Zustände, und die wahre Zustandsgleichung muss in diesen Bereichen modifiziert werden. Die Bereiche rechts und links der nicht-konvexen Bereiche werden als zwei verschiedene Phasen des Materials interpretiert, einer Gasphase und einer Flüssigkeitsphase. Um eine physikalisch sinnvolle Freie Energie, die konvex als Funktion von V ist, zu erhalten, ersetzt man den Verlauf der Isothermen im konkaven Bereich durch eine Kurve, die der Koexistenz der beiden Phasen bei den Volumina V_A und V_B entspricht.

Leiten Sie aus der Bedingung mechanischer Stabilität ($P_A = P_B$) für diesen Fall den Verlauf der Isothermen im $F - V$-Diagramm und im $P - V$-Diagramm ab. Zeigen Sie, dass sich die Lage der Endpunkte V_A und V_B des Koexistensbereichs von Gas und Flüssigkeit im $P - V$-Diagramm aus der Bedingung

$$\int_{V_A}^{V_B} P \, dV = P_A(V_B - V_A) \tag{2}$$

ergibt. Gl. (2) entspricht der Maxwellkonstruktion. Bei der Maxwellkonstuktion bestimmt man die Kurve $P = P_A$ und die Endpunkte V_A und V_B im $P - V$-Diagramm so, dass die jeweiligen Flächen zwischen der Van-der-Waals-Isothermen und der wahren Isothermen im Koexistenzbereich oberhalb und unterhalb von $P = P_A$ ein bestimmtes Verhältnis haben. Welches?

(d) Die Maxwell-Konstruktion lässt sich auch ganz allgemein aus den Bedingungen für thermodynamische Stabilität der Koexistenz zweier Phasen A und B ableiten. Wegen des möglichen Austauschs von Teilchen zwischen den beiden Phasen muss $\mu_A = \mu_B$ gelten. Mecahnische Stabilität erfordert $P_A = P_B$. Benutzen Sie diese Bedingungen und die Gibbs-Duhem-Relation, um Gl. (2) herzuleiten.

(e) Bei einer kritischen Temperatur T_c reduziert sich der Koexistenzbereich auf einen Punkt $P_c(V_c)$ im $P - V$-Diagramm. Bestimmen Sie T_c, V_c und P_c als Funktion von a, b und N.

2. Cluster Entwichlung im Ising Modell ($5+5+5+5+10 = 30$ Punkte, schriftlich)
In der Vorlesung haben Sie gelernt, wie man das Ising Modell mit Hilfe der Transfer-Matrix Methode löst. Hier behandeln wir eine andere Methode, die so genannte Cluster-Entwicklung. Diese kann dazu benutzt werden eine exakte Lösung des zweidimensionalen Ising Modells zu finden und ist insbesondere im Grenzfall hoher Temperaturen nützlich.

Betrachten Sie ein Ising Modell in d Dimensionen mit Spins in den Ecken eines quadratischen Gitters und ohne äuseres Magnetfeld. Die Zustandssumme ist dann durch

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{\sigma\}} \Pi_{\langle ij \rangle} e^{\frac{J}{kT}\sigma_i \sigma_j} \tag{3}$$

gegeben, wobei J die Kopplungsstärke zwischen nächsten Nachbarn i und j ist, $\{\sigma\}$ alle möglichen Spinkonfigurationen und $\langle i, j \rangle$ alle Paare nächster Nachbarn bezeichnet. Jeder Spin nimmt einen der möglichen Werte $\sigma_i = \pm 1$ an.

(a) Beweisen Sie

$$e^{\frac{J}{kT}\sigma_i \sigma_j} = \cosh\left(\frac{J}{kT}\right) + \sigma_i \sigma_j \sinh\left(\frac{J}{kT}\right) \tag{4}$$

(b) Zeigen Sie, dass man die Zustandssumme in folgender Form schreiben kann,

$$Z = \cosh^P\left(\frac{J}{kT}\right) \sum_{\{\sigma\}} \Pi_{\langle ij \rangle} \left(1 + \sigma_i \sigma_j \tanh\left(\frac{J}{kT}\right)\right). \tag{5}$$

Was ist die Bedeutung der Zahl P? Mit dem Ergebnis aus b) kann man die Zustandssumme auch schreiben als

$$\begin{aligned} Z &= \cosh^P\left(\frac{J}{kT}\right) \sum_{\{\sigma\}} (1 + \tanh\left(\frac{J}{kT}\right)(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + ...) + \\ &+ \tanh^2\left(\frac{J}{kT}\right)(\sigma_1\sigma_2\sigma_2\sigma_3 + ...) + \tanh^3\left(\frac{J}{kT}\right)(\sigma_1\sigma_2\sigma_2\sigma_3\sigma_3\sigma_4 + ...) + ...) \end{aligned} \tag{6}$$

Das ist die sogenannte Cluster-Entwicklung.

Die offenen Cluster (z.B. der blaue Cluster in Abbildung 1 oder eigentlich jeder 2-Spin Cluster) liefern keinen Beitrag, aufgrund der Summation über $\sigma_i = \pm 1$ am Ende. Im gegensatz dazu liefern Geschlossene Cluster (wie der rote in Abbildung 1) einen nicht verschwindenden Beitrag, da jeder Spin im Cluster in Gl (6) quadriert wird.

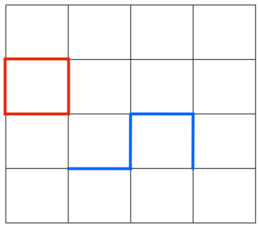

Abbildung 1: Cluster-Entwicklung für das Ising Modell auf einem quadratischen Gitter. Rot – ein Beispiel für ein geschlossenes Cluster. Blau – ein Beispiel für ein offenes Cluster.

Für die Zustandssumme ergibt sich dann

$$Z = \cosh^P\left(\frac{J}{kT}\right)\sum_{\{\sigma\}}\left[1 + C_4\tanh^4\left(\frac{J}{kT}\right) + C_6\tanh^6\left(\frac{J}{kT}\right) + ...\right], \qquad (7)$$

wobei C_{2m} die Anzahl der geschlossenen $2m$-Spin Cluster ist. Nutzen Sie die Cluster Methode, um die Zustandssumme folgender Systeme zu berechnen:

(c) die offene eindimensionale Ising Kette mit N Spins (der erste Spin und der letzte Spin sind nicht verbunden)

(d) die geschlossene eindimensionale Ising Kette mit N Spins (der erste Spin σ_1 und der letzte Spin σ_N sind verbunden)

(e) das zweidimensionale Ising Modell auf einem quadratischen Gitter mit N Spins. Betrachten Sie hier nur den Grenzfall hoher Temperaturen (hierzu reicht es aus die 4-Spin Cluster zu betrachten). Berechnen Sie die Zustandssumme und die Wärmekapazität des Systems.

3. $S = 1$ **Ising Modell** (10 + 10 = 20 Punkte, mündlich)

Nun betrachten wir die eindimensionale Ising Kette mit $S = 1$ und periodischen Randbedingungen. Der Hamilton Operator is durch $H = -J\sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1}$ gegeben.

(a) Beschreiben Sie kurz, wie die Transfermatrix Methode genutzt werden kann, um die statistischen Eigenschaften des eindimensionalen Gitter Modells mit kurzreichweitiger Wechselwirkung zu berechnen. Geben Sie die Transfermatrix für die oben beschriebene $S = 1$ Ising Kette an.

(b) Berechnen Sie die Eigenwerte der Transfermatrix. Hinweis: Sie können einen Eigenvektor der Matrix durch Berücksichtigung der Symmetrie bestimmen. Die beiden anderen Eigenvektoren sind dann orthogonal zu dem vorherigen Vektor (aufgrund der Symmetrie der Transfermatrix).