Universität Würzburg
Wintersemester 2024/25

Prof. Dr. Giorgio Sangiovanni
Linus Aliani, Alexander Baum,
Max Fischer, Jonathan Karl, Niklas Witt

# 12. Übung Statistische Mechanik und Thermodynamik

**Bitte laden Sie Ihre Lösungen bis Donnerstag, den 30.01.2025 um 16:00 Uhr auf WueCampus hoch.**
**Die Blätter dürfen Sie dabei in Zweiergruppen abgeben.**
**Die letzte Aufgabe enthält Bonuspunkte, die mit $*$ gekennzeichnet sind.**

**Aufgabe 1** *Störungstheorie klassischer wechselwirkender Systeme* **5 P.**

Betrachten Sie ein klassisches nichtwechelwirkendes System von $N$ ununterscheidbaren Teilchen mit Hamiltonfunktion

$$H = H_0 + \lambda H_{\text{int}}, \tag{1}$$

mit kleinem dimensionslosen Entwicklungsparameter $\lambda \ll 1$. Die kanonische Zustandssumme ist gegeben durch

$$Z_N = \int \frac{d^{3N}p\; d^{3N}q}{N!h^{3N}} e^{-\beta H}, \tag{2}$$

die im Allgemeinen nicht in geschlossener Form berechenbar ist. Ein Lösungsansatz ist die Störungstheorie, d.h. Entwicklung in $\lambda$.

a) Zeigen Sie, dass die störungstheoretische Reihenentwicklung der kanonischen Zustandssumme gegeben ist durch *3 P.*

$$Z_N = Z_N^{(0)} \left( 1 + \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} \langle (-\beta H_{\text{int}})^n \rangle_0 \right), \tag{3}$$

mit $Z_N^{(0)}$ der Zustandssumme für den wechselwirkungsfreien Fall. Diese ist gegeben durch

$$Z_N^{(0)} = \int \frac{d^{3N}p\; d^{3N}q}{N!h^{3N}} e^{-\beta H_0}, \tag{4}$$

wobei $\langle O \rangle_0$ den Erwartungswert der Observablen $O$ im wechselwirkungsfreien Fall bezeichnet

$$\langle O \rangle_0 = \frac{1}{Z_N^{(0)}} \int \frac{d^{3N}p\; d^{3N}q}{N!h^{3N}} O e^{-\beta H_0}. \tag{5}$$

b) Berechnen Sie die Störungsreihe der freien Energie $F$ bis zur zweiten Ordnung in $\lambda$. Erklären Sie, warum der Beitrag der zweiten Ordnung die Varianz des wechselwirkenden Beitrags $H_{\text{int}}$ zur Hamilton-Funktion, d.h. $\langle H_{\text{int}}^2 \rangle_0 - \langle H_{\text{int}} \rangle_0^2$ enthält. *2 P.*

**Aufgabe 2** *Molekularfeldtheorie des Ising Modells* **10 + 10* P.**

Betrachten Sie folgenden Ising-Hamilton-Operator

$$H_{\text{Ising}} = -B \sum_{i=0}^{N} s_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{i,j} s_i s_j \tag{6}$$

mit dem Magnetfeld $B$ und einer Spinwechselwirkung $J_{ij}$, wobei die Spins die Werte $s = \pm 1$ annehmen können und $\sum_{ij} = \sum_i^N \sum_j^N$. Sei $m \equiv \langle s_i \rangle$ ein (noch unbekannter) homogener Spinmittelwert und $a_{i,j} \equiv (s_i - m)(s_j - m)$ die quadratische Abweichung von diesem.

a) Ersetzen Sie das Spinprodukt $s_i s_j$ im Hamilton-Operator $H_{\text{Ising}}$ in dem Sie $a_{i,j} \approx 0$ nähern (Molekularfeldnäherung). Nimmt man des Weiteren ein homogenes mit Translationsinvarianz an, so hängt die Wechselwirkung $J_{ij}$ nur vom Indexabstand $i - j$ ab und damit wird $\sum_i J_{ij} = \sum_i J_{i-j} = \Theta$ wobei $\Theta$ eine j-unabhängige Konstante ist. Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator damit die folgende Form annimmt: *3 P.*

$$H_m = -\tilde{B} \sum_i s_i + C \tag{7}$$

und bestimmen Sie B und C.

b) Der Hamiltonian in (7) beschreibt eine freie (d.h. nicht-wechselwirkende) Theorie, die sich lösen lässt. Zeigen Sie, dass sich die Zustandssumme des durch $H_m$ beschriebenen Systems schreiben lässt als $Z = e^{-\beta C} \left( 2 \cosh \beta \tilde{B} \right)^N$. *3 P.*

c) Zeigen Sie unter Nutzung der Definition der Magnetisierung $m = \frac{1}{N} \langle \sum_i s_i \rangle$, dass gilt *4 P.*

$$m = \tanh\{(B + \Theta m)\beta\}, \tag{8}$$

was eine Bestimmung von $m$ auf eine selbstkonsistente Weise ermöglicht. Wie sieht die Gleichung und ihre Lösung(en) für niedrige Temperaturen $\beta \to \infty$ aus?

d) Demonstrieren Sie (grafisch oder näherungsweise durch Taylor-Entwicklung nach kleinen $\beta\Theta m$), dass für $B = 0$ der Fall $m = m_{\text{FM}} \neq 0$ eintreten kann (spontane Magnetisierung). *5* P.*
*Hinweis: Nutzen Sie die Taylorreihe bis zur dritten Ordnung* $\tanh x \approx x - \frac{x^3}{3}$.

e) Zeigen Sie, dass das System für hohe Temperaturen $\beta \to 0$ nur die Lösung $m = 0$ hat. Bei welcher Temperatur $T_c$ ist der Phasenübergang? *5* P.*
*Hinweis: Nutzen Sie die Näherung in d) und suchen Sie nach dem Wert für $\beta$, an dem $m_{\text{FM}} = 0$ gilt.*