Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie
der Kondensierten Materie

Übungen zur Theoretischen Physik Fb SS 18

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny

Blatt 3
Besprechung 11.05.2018

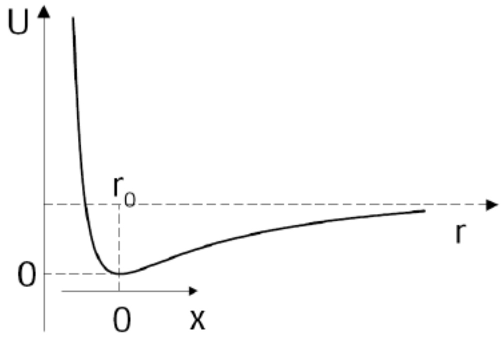
---

1. Anharmonischer Oszillator: (35 Punkte)

Die Wechselwirkung zwischen den beiden Atomen eines zweiatomigen Moleküls kann durch ein Potential $U(r)$ beschrieben werden, wobei r den Abstand der Atome bezeichnet. Das Molekül sei in ein Kristallgitter eingebunden, so daßdie Rotationsfreiheitsgrade unterdrückt sind und vernachlässigt werden können. Für kleine Auslenkungen $x = r - r_0$ aus der Ruhelage r_0 kann U um r_0 entwickelt werden. Dann wird das Molekül durch den Hamiltonoperator

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}, \qquad \widehat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \hat{x}^2, \qquad \widehat{V} = \alpha \hat{x}^3,$$

beschrieben, mit der effektiven Masse m und der Eigenfrequenz ω_0. Betrachten Sie den anharmonischen Term $\widehat{V}$ als kleine Störung. Das Kristall wirkt als Wärmebad mit der Temperatur T (kanonische Gesamtheit).



(a) Berechnen Sie Zustandssumme Z_0 und freie Energie F_0 des ungestörten Systems $\widehat{H}_0$. Bestimmen Sie die Korrektur F_1 zur freien Energie in 1. Ordnung Störungstheorie:

$$F = F_0 + F_1 + \ldots, \qquad F_1 = \langle \widehat{V} \rangle_0 = \mathrm{Tr}\left(\widehat{W}_0 \widehat{V} \right), \qquad \widehat{W}_0 = \frac{e^{\widehat{H}_0/T}}{Z_0}.$$

Hinweis: Benutzen Sie Auf- und Absteigeoperatoren $a^\dagger$ und a.

(b) In 1. Ordnung Störungstheorie ist ein thermischer Mittelwert, $\langle \hat{A} \rangle$, gegeben durch

$$\mathrm{Tr}\left(\widehat{W} \hat{A} \right) = \mathrm{Tr}\left(\widehat{W}_0 \hat{A} \right) + \mathrm{Tr}\left(\widehat{W}_1 \hat{A} \right),$$

wobei

$$\widehat{W}_1 = -\widehat{W}_0 \int\limits_0^{1/T} d\tau \left[\widehat{V}_\tau - \langle \widehat{V} \rangle_0 \right], \qquad \widehat{V}_\tau = e^{\tau \widehat{H}_0} \widehat{V} e^{-\tau \widehat{H}_0}.$$

Gesucht ist die mittlere Ausdehnung $\langle \hat{x} \rangle = \mathrm{Tr}\left(\widehat{W}\hat{x}\right)$ des Moleküls in 1. Ordnung. Berechnen Sie $\mathrm{Tr}\left(\widehat{W}_0\hat{x}\right)$ und zeigen Sie zunächst, dass

$$\mathrm{Tr}\left(\widehat{W}_1\hat{x}\right) = \frac{1}{Z_0}\sum_{n,m=0}^{\infty}\langle m|\widehat{V}|n\rangle\langle n|\hat{x}|m\rangle\frac{e^{-E_n/T}}{E_n - E_m} + c.c.$$

Hier "c.c." bedeutet "komplex konjugiert".

(c) Bringen Sie $\mathrm{Tr}\left(\widehat{W}_1\hat{x}\right)$ auf die Form

$$\mathrm{Tr}\left(\widehat{W}_1\hat{x}\right) = -\frac{C}{Z_0}\sinh\frac{\omega_0}{2T}\sum_{n=1}^{\infty}n^2 e^{-\omega_0 n/T}.$$

(d) Berechnen Sie die Summe in $\mathrm{Tr}\left(\widehat{W}_1\hat{x}\right)$ und damit die Verschiebung der Ruhelage durch das anharmonische Potential.

(e) Wie verläuft $\langle \hat{x} \rangle$ qualitativ im Bereich $0 \leqslant T < \infty$ für $\alpha < 0$? Berechnen Sie den thermischen Ausdehnungskoeffizienten

$$\kappa = \frac{1}{r_0}\frac{\partial\langle \hat{x}\rangle}{\partial T}.$$

2. Molekularfeldtheorie des Ising-Modells: (35 Punkte)

Betrachten Sie ein Ising-Modell aus N Spins ($\sigma_i = \pm 1$) mit Magnetfeld H und unendlicher Reichweite der Wechselwirkung ($J > 0$):

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N}\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j - H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i.$$

Die Summe im ersten Term läuft über alle Spinpaare. Die Molekularfeldtheorie funktioniert hier völlig analog zum in der Vorlesung besprochenen Heisenberg-Modell.

(a) Benutzen Sie die Transformation (Nachprüfen!)

$$\exp\left(\frac{J}{2NT}\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j\right) = \exp\left[\frac{J}{2NT}\left(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right)^2\right] = \sqrt{\frac{N}{2\pi JT}}\int dh \exp\left(-\frac{Nh^2}{2JT} + \frac{h}{T}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right),$$

um die Summen über $\sigma_i = \pm 1$ in der Zustandssumme auszuführen.
Hinweis: Das Ergebnis hat die Form

$$Z = \sqrt{\frac{N}{2\pi JT}}\int dh e^{-\mathcal{G}(H,T,h)/T}.$$

(b) Analysieren Sie den Integranden bzw. den Exponenten $\mathcal{G}(H,T,h)$. Finden Sie eine Gleichung für den Wert $h_0(H;T)$ von h, bei dem der Integrand maximal wird. Vergleichen Sie mit der Selbstkonsistenzgleichung der Molekularfeldtheorie des Heisenberg-Modells aus der Vorlesung, was ist das effektive Feld H_{eff}?

(c) Im thermodynamischen Limes $N \gg 1$ kommt der dominante Beitrag zum Integral aus der Region um $h \approx h_0$. Warum? Ersetzen Sie $h = h_0 + \delta h$, entwickeln Sie $\mathcal{G}$ bis zur Ordnung $(\delta h)^2$ und führen Sie die Integration über δh aus.

Hinweis: Verwenden Sie die Gleichung für h_0 um H zu eliminieren.

(d) Berechnen Sie die freie Enthalpie $G(H,T) = -T \ln Z$ und zeigen Sie, dass für $h_0 \ll J$ gilt

$$\frac{G(H,T)}{N} \approx \frac{T_c - T}{2} m^2 + b m^4 - T \ln 2,$$

wobei

$$m(H,T) = h_0(H,T)/J,$$

die Magnetisierung ist. Was ist hier T_c und b?

3. Cluster-Entwicklung des 2D-Ising-Modells: (30 Punkte)

Betrachten Sie ein 2D-Ising-Modell aus $N \gg 1$ Spins ohne äußeres Magnetfeld auf einem Quadratgitter (Koordinationszahl $z = 4$) mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j .$$

(a) Bringen Sie die Zustandssumme auf die Form

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{T}\right)^P \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle ij \rangle} \left[1 + \sigma_i \sigma_j \tanh \frac{J}{T}\right].$$

P ist hier die Zahl der Nächste-Nachbar-Paare, für $N \gg 1$ ist bis auf Randeffekte $P = zN/2$.

(b) Überlegen Sie sich, dass man Z wie folgt entwickeln kann:

$$Z = \left(\cosh \frac{J}{T}\right)^P \sum_{\{\sigma\}} \Bigg[1 + \tanh \frac{J}{T} \left(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \dots\right) + \tanh^2 \frac{J}{T} \left(\sigma_1\sigma_2\sigma_2\sigma_3 + \dots\right) + \tanh^3 \frac{J}{T} \left(\sigma_1\sigma_2\sigma_2\sigma_3\sigma_2\sigma_4 + \dots\right)\Bigg].$$

Das ist die sogenannte Cluster-Entwicklung des Ising-Modells. Welche Terme tragen zu Z bei? Zeigen Sie, dass

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

wobei C_n die Zahl der geschlossenen n-Spin-Cluster ist.

(c) Betrachten Sie den Grenzfall hoher Temperaturen $T \gg J$ und berechnen Sie die Wärmekapazität bis zur vierten Ordnung in J/T .