Theoretische Physik IV: Statistische Mechanik und Thermodynamik

9. Übungsblatt

Abgabedatum: Freitag, 27.6.08 in den Übungen

Aufgabe 9.1 *(Zipper-Modell Teil II)* **(10 Punkte)**

In Aufgabe 4.2 hatten wir bereits das Zipper-Modell betrachtet. Die Zustandssumme des Modells ist gegeben durch

$$Z_N = \frac{1-x^N}{1-x}, \qquad x = G\exp(-\beta\epsilon)$$

Wir wollen nun untersuchen, ob das System einen Phasenübergang in Bezug auf den Ordnungsparameter $\langle s \rangle$ aufweist.

(a) Entwickle $\ln Z_N$ um den Punkt $x = 1 + \eta$ für $\eta \ll 1$ und entwickle dann $\langle s \rangle$ für $\eta \ll 1$ und $N \gg 1$. (5 Punkte)

(b) Zeige, dass der Bruchteil der offenen Linker bei $\eta = 0$ im thermodynamischen Limes einen Sprung macht, d.h. zeige dass $\frac{1}{N}\frac{d\langle s \rangle}{d\eta}$ dort divergiert. Ein Sprung des Ordnungsparameters weist auf einen Phasenübergang *erster* Ordnung hin. (3 Punkte)

(c) Bestimme die Übergangstemperatur T_c. (2 Punkte)

Aufgabe 9.2 *(Modifiziertes Van-der-Waals Gas)* **(10 Punkte)**

Betrachte ein modifiziertes Van-der-Waals Gas, welches folgender Zustandsgleichung genügt (v ist das Molvolumen):

$$(p + \frac{a}{Tv^2})(v-b) = RT \quad (n > 1)$$

(a) Bestimme die kritischen Konstanten p_c, v_c und T_c (analog zu Aufgabe 6.3). (3 Punkte)

(b) Lässt sich die Zustandsgleichung in eine universelle Form bringen analog zu der van-der-Waals-Zustandsgleichung? Wenn ja, wie sieht die Gleichung dann aus? (3 Punkte)

(c) Bestimme die kritischen Exponenten γ (definiert durch $\kappa_T \sim |\frac{T-T_c}{T_c}|^{-\gamma}$) und δ (definiert durch $p - p_c \sim |v - v_c|^\delta$ bei $T = T_c$). Entwickle dazu die Zustandsgleichung um den kritischen Punkt ganz analog dem in der Vorlesung behandelten van-der-Waals-Gases. (4 Punkte)

Aufgabe 9.3 *(Binäre Mischung)* **(10 Punkte)**

Wir betrachten ein System, welches aus zwei Sorten von Molekülen (A und B) auf einem kubischen Gitter besteht. Jeder Gitterplatz kann entweder mit einem Molekül der Sorte A oder B besetzt sein, wobei jedes Atom nur mit den sechs direkten Nachbarn wechselwirken kann. Wir nehmen eine Wechselwirkungsenergie $-J$ zwischen benachbarten Molekülen der gleichen Sorte (A—A und B—B) an, während Paare A—B nicht wechselwirken. Die Gesamtzahl der Gitterplätze sei N, die Anzahl der Atome vom Typ A sei N_A, die Anzahl der Atome vom Typ B entsprechend N_B ($N = N_A + N_B$).

(a) Schätze die Gesamtenergie des Systems ab unter der Annahme, dass die Atome zufällig auf die N Gitterplätze gesetzt werden, d.h. jeder Gitterplatz wird mit der Wahrscheinlichkeit N_A/N mit einem Molekül A und mit Wahrscheinlichkeit N_B/N mit einem Molekül B besetzt. (2 Punkte)

(b) Berechne die Entropie dieser Mischung unter der gleichen Annahme. (2 Punkte)

(c) In dieser Näherung, schreibe die freie Energie $F(x)$ als Funktion von $x = (N_A - N_B)/N$. Entwickle $F(x)$ bis zur vierten Ordnung und zeige, dass die freie Energie unterhalb einer kritischen Temperatur T_c nicht mehr konvex ist. Gebe T_c an. (4 Punkte)

(d) Zeichne $F(x)$ für $T < T_c$, $T = T_c$ und $T > T_c$. (2 Punkte)

Bonusaufgabe 9.4 *(Flüssigkristalle)* **(10 Extrapunkte)**

Hinweis: Diese Aufgabe kann freiwillig gelöst werden, um den Punktestand aufzubessern.

Ein Flüssigkristall besteht aus anisotropen Molekülen. Dieser verhält sich wie eine Flüssigkeit, weil die Schwerpunkte der Moleküle keine langreichweitige Ordnung besitzen. Andererseits verhält er sich wie ein Kristall, weil die Ausrichtung der Moleküle sehr wohl langreichweitige Ordnung besitzt. Der Ordnungsparameter eines Flüssigkristalls ist gegeben durch

$$\mathbf{S} = \eta \left[\mathbf{nn} - \frac{1}{3}\mathbf{I} \right]$$

$\mathbf{n}$ ist ein Einheitsvektor, der die mittlere Richtung der Moleküle angibt. $\mathbf{nn}$ ist das dyadische Produkt der Vektoren. Die freie Energie des Flüssigkristalls ist

$$F = F_0 + \frac{1}{2} A S_{ij} S_{ij} - \frac{1}{3} B S_{ij} S_{jk} S_{ki} + \frac{1}{4} C S_{ij} S_{ij} S_{kl} S_{kl}$$

wobei $A = A_0(T - T^\star), A_0, B$ and C Konstanten darstellen. Über mehrfach vorkommende Indizes wird summiert!

$\mathbf{I}$ ist die Einheitsmatrix. In den Basisvektoren $\mathbf{e}_i$ gilt dann

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{I} \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}, \qquad S_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{e}_j$$

(a) Berechne die freie Energie F, d.h. führe die Summation aus und schreibe F in Abhängigkeit von η, A, B, C. (5 Punkte)

(b) Berechne die kritische Temperatur T_c, bei der der Phasenübergang von der isotropen Flüssigkeit zum Flüssigkristall stattfindet. (5 Punkte)