Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Carsten Bauer

Statistische Physik

Blatt 13

WS 2017/18

Abgabe: Bonusblatt

Webseite: http://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2017-StatPhys.shtml

Aufgabe 38: Landau-Theorie des Ising Ferromagneten

Wir betrachten einen Ising Ferromagneten, bestehend aus N Spins, beschrieben durch den Hamiltonian

$$H = -\sum_{i=1}^{N} s_i \left(h + \frac{J}{2} \sum_{j \in \mathcal{U}(i)} s_j \right) ,$$

wobei wir mit h das externe Feld und $\mathcal{U}(i)$ die Nachbarn von Spin i bezeichnen. Wir betrachten ein hyperkubisches Gitter in d räumlichen Dimensionen, sodass jeder Spin $z = 2d$ Nachbarn habe.

Wir betrachten im folgenden die Magnetisierung des Ferromagneten, bzw. die Zahl der nach oben zeigenden Spins, $m = (N_+ - N_-)/N = 2N_+/N - 1$ als zentrale Variable.

a) Zeigen Sie, dass die Entropie pro Teilchen $s = S/N$ des Ferromagneten (in der Stirling-Näherung) gegeben ist durch

$$-\frac{s}{k_B} = \left(\frac{1+m}{2}\right) \ln\left(\frac{1+m}{2}\right) + \left(\frac{1-m}{2}\right) \ln\left(\frac{1-m}{2}\right) + \text{const.} \tag{1}$$

b) In der Molekularfeldnäherung machen wir den Ansatz, dass wir die effektiven Felder $h_i = \left(h + \frac{J}{2} \sum_{j \in \mathcal{U}(i)} s_j\right)$ durch ihren Mittelwert $\langle h_i \rangle = \left(h + \frac{J}{2} z m\right)$ ersetzen, wobei $m = \langle s_i \rangle$ aufgrund von Symmetrie nicht von der Position des Spins abhängt. Zeigen Sie, dass die Energie $e = E/N$ pro Teilchen des Ferromagneten gegeben ist durch

$$e = -hm - dJm^2 \ . \tag{2}$$

Der Ferromagnet befinde sich nun im Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T. Analog zum van-der Waals-Gas, stellt sich nun diejenige Magnetisierung $\overline{m}$ ein, welche die variationelle freie Energie pro Teilchen $f(m; T, h) = e(m; h) - Ts(m; h)$ minimiert (bzw. die Entropie des Systems Ferromagnet+Wärmebad maximiert) und dies definiert uns die freie Energie des Systems:

$$F(T, h) = \min_m N f(m; T, h) = N f(\overline{m}; T, h) \tag{3}$$

c) Entwickeln Sie nun $f(m;T,h)$ bis zur 4.Ordnung um $m = 0$ und zeigen Sie

$$f(m;T,h) = -hm + \left(-dJ + \frac{k_B T}{2}\right) m^2 + \frac{k_B T}{12} m^4 + \text{const.} \tag{4}$$

Wir betrachten im Folgenden nur den Fall $h = 0$.

d) Den Phasenübergang erkennen wir daran, dass es für $T > T_c$ nur ein Minimum von (4) gibt und für $T < T_c$ zwei verschiedene. Bestimmen Sie T_c aus (4). Zeichnen Sie als Erklärung $f(m;T,h)$ qualitativ für zwei Temperaturen $T_1 > T_c > T_2$.

e) Wir definieren erneut $\Delta T = (T - T_c)/T_c$. Für $T < T_c$ hat (4) zwei minimierende Lösungen $\pm\overline{m}$. Zeigen Sie, dass

$$\overline{m} = \sqrt{3\left|\frac{\Delta T}{1 + \Delta T}\right|} \approx \pm\sqrt{3|\Delta T|}\ ,\ \ \Delta T < 0 \tag{5}$$

gilt. Zeichnen Sie die Funktion $\overline{m}(T)$ in der Nähe der kritischen Temperatur und vergleichen Sie mit Ihrem Ergebnis für das van-der-Waals-Gas aus Aufgabe 36e).

Aufgabe 39: Belousov-Zhabotinsky Reaktion

In dieser Aufgabe wollen wir die Phänomenologie der Belousov-Zhabotinsky Reaktion (Vorlesung am Mittwoch) anhand eines *zellulären Automaten* modellieren und numerisch simulieren.

Die Zellen des zellulären Automaten sein durch drei Parameter $a, b, c \in [0, 1)$ beschrieben, welche die Konzentration dreier Spezies beschreiben sollen. Zu Anfang seien die Werte zufällig aus dem möglichen Wertebereich gewählt.

Der zelluläre Automat funktioniert nun nach den folgenden Regeln:

- Für jede Zelle wird der durchschnittliche Wert $\overline{a}, \overline{b}, \overline{c}$ als Mittelwert der acht umgebenden Zellen sowie des Werts der Zelle selbst berechnet.
- Der neue Zustand ist dann gegeben durch

$$a = \min\big(1.0,\ \overline{a}\cdot\big(1. + \overline{b} - \overline{c}\big)\big)$$
$$b = \min\big(1.0,\ \overline{b}\cdot(1. + \overline{c} - \overline{a})\big)$$
$$c = \min\big(1.0,\ \overline{c}\cdot\big(1. + \overline{a} - \overline{b}\big)\big)$$

Beachten Sie, dass alle Zellen gleichzeitig in den neuen Zustand übergehen, d.h. die Berechnung der Mittelwerte darf ausschließlich mit den Werten des vorherigen Iterationsschritts passieren und nicht mit denen der schon partiell veränderten Matrix.

In diesem Julia Notebook finden Sie ein Programm-Skelett, das Sie um das Update der Zellen erweitern sollen. Visualisiert werden kann der zelluäre Automat, in dem eine der drei Konzentrationen dargestellt wird.

In dem Notebook finden Sie außerdem ein eingebettes Video, das eine experimentelle Umsetzung dieses zellulären Automaten zeigt.