

Prof. Holger Stark (Sprechstunde: Fr 11:30-12:30 in EW 709)
Maximilian Schmitt (Sprechstunde: Do 10:00-11:00 in EW 708)

13. Übungsblatt – Statistische Physik

Abgabe/Vorrechnen: Di. 05.02.2013 im Tutorium (10:15-11:45 H 0112)

M Aufgabe 35: Landauentwicklung einer binären Mischung I

Eine Legierung (z.B. Messing) bestehe aus N_A Atomen des Typs A und N_B Atomen des Typs B , stellt also eine sog. binäre Mischung dar. Die Atome sind in einem kubischen primitiven Gitter angeordnet und wechselwirken nur mit ihren 6 nächsten Nachbarn. Die Wechselwirkungsenergie hat den Wert $-J$ (anziehend) zwischen gleichen Atomen ($A-A$ und $B-B$) und den Wert $+J$ (abstoßend) zwischen verschiedenen Atomen ($A-B$). Es gilt $J > 0$.

- (a) In welcher Konfiguration ist die Energie minimal?
- (b) Berechnen Sie die Gesamtwechselwirkungsenergie U unter der Annahme, dass die Atome zufällig auf N Plätzen verteilt sind.

S Aufgabe 36 (4 Punkte): Landauentwicklung einer binären Mischung II

- (a) Berechnen Sie die Mischungsentropie S unter der Annahme $N_A, N_B \gg 1$. Verwenden Sie die Stirlingformel $\ln N! \approx N \ln N - N$.
- (b) Berechnen Sie die Freie Energiedichte $f = F/N$ als Funktion des Ordnungsparameters $\phi \equiv (N_A - N_B)/N$. Entwickeln Sie $f(\phi)$ bis zur vierten Ordnung in ϕ :

$$f(\phi) \approx a_0(T) + \frac{a_2(T)}{2} \phi^2 + \frac{a_4(T)}{4} \phi^4.$$

Solch eine Entwicklung nennt man Landauentwicklung. Zeigen Sie, dass $f(\phi)$ unterhalb einer kritischen Temperatur T_c nicht mehr überall konvex ist und skizzieren Sie $f(\phi)$ für $T > T_c$, $T = T_c$, $T < T_c$ und $T = 0$. Berechnen Sie den kritischen Exponenten β .

Rechnen Sie im folgenden mit der genäherten Freien Energiedichte weiter.

- (c) Bestimmen Sie die sogenannte Spinodale $\phi_{sp}(T)$. Diese begrenzt den Bereich $\phi < |\phi_{sp}(T)|$, in dem $f(\phi)$ für $T < T_c$ nicht konvex ist. Dieser Bereich ist charakterisiert durch eine Phasenseparation in von A bzw. B Atomen dominierte Bereiche mit $\phi = \pm \phi_{eq}(T)$, wobei $\pm \phi_{eq}(T)$ die Funktion $f(\phi)$ minimiert. Bestimmen Sie $\phi_{eq}(T)$. Zeichnen Sie $\pm \phi_{eq}(T)$ und $\pm \phi_{sp}(T)$ in ein (T, ϕ) Diagramm ein.

S Aufgabe 37 (6 Punkte): Ginzburg-Landau Theorie

Für allgemeine inhomogene Systeme im Nichtgleichgewicht, d.h. solche mit orts- und zeitabhängigem Ordnungsparameter $\phi(\mathbf{r}, t)$, wird die Freie Energie zu einem Funktional verallgemeinert:

$$F[\phi(\mathbf{r}, t)] = \int d^3\mathbf{r} \left\{ f(\phi) + \frac{\gamma}{2} (\nabla\phi)^2 \right\}.$$

mit der Landauentwicklung $f(\phi)$ aus Aufgabe 36. Der Term $\frac{\gamma}{2} (\nabla\phi)^2$ mit $\gamma > 0$ berücksichtigt Inhomogenitäten von ϕ .

- (a) Die Variation von F beschreibt nun die Energieänderung, wenn Atome (oder i.A. Teilchen) die Position ändern. Wir fassen diese Änderung daher als chemisches Potential auf mit

13. Übung SP WS12

$\mu = \frac{\delta F}{\delta \phi}$. Zeigen Sie, dass man zusammen mit dem 1. Fick'schen Gesetz $\mathbf{j} = -D\nabla\mu$ und der Kontinuitätsgleichung zur sog. Cahn-Hilliard Gleichung gelangt:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D\nabla^2 [a_2\phi + a_4\phi^3 - \gamma\nabla^2\phi] .$$

Hinweis: Die Variationsableitung ist definiert über $\int \frac{\delta F}{\delta \phi} \delta \phi d^3\mathbf{r} = \left. \frac{d}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} F[\phi + \epsilon\delta\phi]$. Verwenden Sie außerdem die partielle Integration im Volumen: $\int_V \nabla w \cdot \mathbf{v} d^3\mathbf{r} = \int_{\partial V} w \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} - \int_V w \nabla \cdot \mathbf{v} d^3\mathbf{r}$.

- (b) Linearisieren Sie die Cahn-Hilliard Gleichung für den Fall niedriger Temperaturen (d.h. Phasenseparation) und machen Sie die Gleichung dimensionslos mit $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial t}$ und $\nabla^n \rightarrow \frac{1}{\lambda^n} \nabla_{\tilde{x}}^n$. Die resultierende Gleichung sollte lauten:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla_{\tilde{x}}^2 [3\phi + \nabla_{\tilde{x}}^2 \phi] .$$

Geben Sie τ und λ an.

- (c) Geben Sie die Fourier-transformierte ($\tilde{x} \rightarrow k$) der linearisierten Cahn-Hilliard Gleichung an. Störungen welcher Wellenlänge (im k -Raum) werden gedämpft, welche verstärkt? Für welche Wellenlänge ist die Verstärkung maximal?