Übung zur Vorlesung
Theoretische Physik III LAG
(Quantenmechanik und statistische Mechanik)

SoSe 2014 **Blatt 12** **10.07.2014**

Aufgabe 34 *Neue Gesamtheit*

Es lässt sich eine Gesamtheit konstruieren, bei der die Makronebenbedingungen

$$U = \sum_{i,z} p_{i,z} E_{i,z} \qquad \text{und} \qquad \langle V \rangle = p_{i,z} V_z$$

an die mittlere Energie U und das mittlere Volumen $\langle V \rangle$ gestellt werden, wobei die Teilchenzahl N als Mikronebenbedingung behandelt wird. Die Summe erstreckt sich über alle Energieeigenwerte, indiziert durch i, und alle Volumina, indiziert durch z. Diese Gesamtheit lässt sich durch ein Gas in einem Zylinder mit beweglichem Stempel realisieren, der von einem Wärmebad umgeben ist und sein Volumen den äußeren Bedingungen anpassen kann.

a) Zeigen Sie dass eine Maximierung der Entropie auf Wahrscheinlichkeiten

$$p_{i,z} = \frac{\exp\left(-\beta E_{i,z} - \gamma V_z\right)}{Z}$$

führt. Geben Sie die Zustandssumme Z an. β und γ sind Konstanten. *(2 Punkte)*

b) Berechnen Sie die Entropie S in Abhängigkeit von T, U und $\langle V \rangle$, indem Sie $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$ und $\gamma' = \gamma/\beta$ definieren. *(1 Punkt)*

c) Zeigen Sie, dass das thermodynamische Potential (hier: freie Enthalpie)

$$G = G(T, \gamma', N) = -k_{\mathrm{B}} T \log Z \qquad \text{auch die Form} \qquad G = U + \gamma' \langle V \rangle - TS$$

besitzt. *(1 Punkt)*

d) Bilden Sie das totale Differential $\mathrm{d}G$ beider Formen von G um durch Vergleich

$$\gamma' = \left(\frac{\partial U}{\partial \langle V \rangle} \right)_{S,N}$$

zu zeigen. Warum kann γ' als Druck p interpretiert werden? *(2 Punkte)*

e) Betrachten Sie zuletzt zwei Systeme L_1 und L_2, die durch einen beweglichen Stempel getrennt sind. Dies erlaubt einen Energieaustausch zwischen den Systemen, wobei das Gesamtsystem abgeschlossen ist. Zeigen Sie, dass im thermischen Gleichgewicht

$$T_1 = T_2 \qquad \text{und} \qquad p_1 = p_1$$

gilt, wobei p_1 und p_2 di Drücke der Systeme L_1 und L_2 darstellen. *(2 Punkte)*

Aufgabe 35 *Ising-Modell*

Wir betrachten N magnetische Momente $\hat{\vec{\mu}}=\mu\hat{\vec{\sigma}}$, die in einer linearen Kette mit gleichem Abstand angeordnet sind und sich in eine konstanten Magnetfeld $\vec{B}=B\vec{e}_z$ befinden. Zusätzlich nehmen wir an, dass *benachbarte* magnetische Momente miteinander wechselwirken. Der Hamiltonoperator dieses Systems ist durch

$$\hat{H} = -\mu B \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_z^{(i)} - I \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(i+1)}$$

gegeben. Der Index i kennzeichnet die einzelnen magnetischen Momente und $\hat{\sigma}_z^{(i)}$ deren Pauli-operator. I gibt die Wechselwirkungsstärke benachtbarter Momente an. Des Weiteren werden periodische Randbedigungen angenommen, d.h. $\hat{\sigma}_z^{(N+1)}=\hat{\sigma}_z^{(1)}$.

a) Interpretieren Sie die beiden Teile von $\hat{H}$ und geben Sie an, welche Energie jedes Moment ohne Wechselwirkungs haben kann. *(1 Punkt)*

b) Berechnen Sie die Zustandsumme Z und zeigen Sie, dass diese auf die Form

$$Z = \mathrm{Sp}\left(P^N\right) \qquad \text{mit} \qquad P = \begin{pmatrix} e^{\frac{I+\mu B}{k_\mathrm{B}T}} & e^{\frac{-I}{k_\mathrm{B}T}} \\ e^{\frac{-I}{k_\mathrm{B}T}} & e^{\frac{I-\mu B}{k_\mathrm{B}T}} \end{pmatrix}$$

gebracht werden kann. *(3 Punkte)*

c) Zeigen Sie, dass Z auch als

$$Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

geschrieben werden kann, wobei λ_1 und λ_2 die Eigenwerte von P sind. *(1 Punkt)*

d) Bestimmen Sie die Eigenwerte nun explizit und überlegen Sie welcher der beiden den größeren Beitrag liefert. (Dies kann bei f) hilfreich sein.) *(1 Punkt)*

e) Zeigen Sie, dass das gesamte mittlere magnetische Moment

$$M = \mu \left\langle \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_z^{(i)} \right\rangle \qquad \text{durch} \qquad M = -\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)_{T,N}$$

gegeben ist, wobei $F = -k_\mathrm{B}T \log Z$ die freie Energie darstellt. *(1 Punkt)*

f) Berechnen Sie mit dem Ergebnis von e) das mittlere magnetische Moment $m = M/N$ im Grenzfall $N \to \infty$ und skizzieren Sie dies als Funktion von $x=\mu B/k_\mathrm{B}T$ für verschiedene Werte von $y=I/k_\mathrm{B}T$. *(1 Punkt)*