11.Übung zur Thermodynamik und Statistik WS2011/12

Ausgabe: 20. Dezember 2011 Priv.-Doz. Dr. U. Löw
Abgabe: 12. Januar 2012 bis $13^{\underline{00}}$Uhr

Hausaufgabe 11.1: Dichtefluktuationen im großkanonischen Ensemble 4 Punkte

Zeigen Sie, dass die Dichtefluktuationen

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2$$

im großkanonischen Ensemble im thermodynamischen Limes, also für $N \to \infty$, verschwindend klein sind.
Hinweis: Differenzieren Sie $\langle N \rangle$ nach der Fugazität.

Hausaufgabe 11.1: Freie Ising-Spins im Magnetfeld 4 Punkte

Wir betrachten die Hamilton-Funktion $H = -B \sum_{i=1}^{N} S_i$, die N unabhängige Ising-Spins mit den beiden Einstellmöglichkeiten $S_i = \pm 1$ in einem Magnetfeld B beschreibt. Diese Freiheitsgrade stellen die z-Komponenten von Spins $\frac{1}{2}$ dar, indem man $S_i^z = \frac{\hbar}{2} S_i$ identifiziert. Jeder einzelne Spin kann also als ein Zwei-Niveau-System aufgefasst werden.

(a) Berechnen Sie die kanonische N-Teilchenzustandssumme Z_N.

(b) Leiten Sie draus die freie Energie F ab.

(c) Gewinnen Sie aus F die Magnetisierung$M = \sum_{i=1}^{N} S_i$.
Tipp: Bestimmen Sie M als geeignete Ableitung von F. Skizzieren Sie $M(B)$ bei konstantem T.

(d) Berechnen Sie die Suszeptibilität $\chi = \frac{\partial M}{\partial B}\big|_{B=0}$.

Hausaufgabe 11.3: Eindimensionales Gittgergas 7 Punkte

Betrachten Sie ein Gas, bei dem sich die Moleküle nur auf einem eindimensionalen periodischen Gitter befinden können. Aufgrund der abstoßenden Wechselwirkung können zwei Moleküle nicht den selben Gitterplatz besetzen. Es gilt daher $S_i = 0$, wenn i unbesetzt ist und $S_i = 1$, wenn i besetzt ist. Aufgrund einer kurzreichweitigen Anziehung ist die Energie eines Zustandes für $\epsilon > 0$ gegeben durch:

$$E = -\epsilon \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} \quad . \tag{1}$$

Es gelten periodische Randbedingungen.

(a) Stellen Sie die großkanonische Zustandssumme auf, wobei n die Anzahl der besetzten Gitterplätze und μ das chemische Potential ist. Wie errechnen sich daraus der Druck p, die Dichte $\rho = \frac{\langle n \rangle}{N}$ und die Kompressibilität $\kappa_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p}$?

(b) Welche Analogie gibt es zu dem in der Vorlesung diskutierten Ising-Modell? Stellen Sie in einer Tabelle die Größen ϵ, μ, p und κ_T den korrespondierenden Größen des Ising-Modells J, H, M und χ gegenüber. Bestimmen Sie p, ρ und κ_T.
Hinweis: Die in der Vorlesung verwendete Variable war $\sigma_i = 2S_i - 1$.

ThS Blatt 11

Philip Hebler, Juri Nyrow

Aufgabe 11.2 (bzw. 11.1, die Zweite)

1	2	3	Σ
/	4	/	4

a) Zustandssumme: $Z_N = Sp\,(e^{-\beta \hat{H}}) = \sum_n e^{-\beta E_n}$

$$E_n = -B \sum_{i=1}^{N} S_i$$

$$\Rightarrow Z_N = \sum_{S_i \in \{-1,1\}} e^{-\beta(-B\sum_{i=1}^{N} S_i)} = \sum_{S_i \in \{-1,1\}} \prod_{i=1}^{N} e^{\beta B S_i}$$

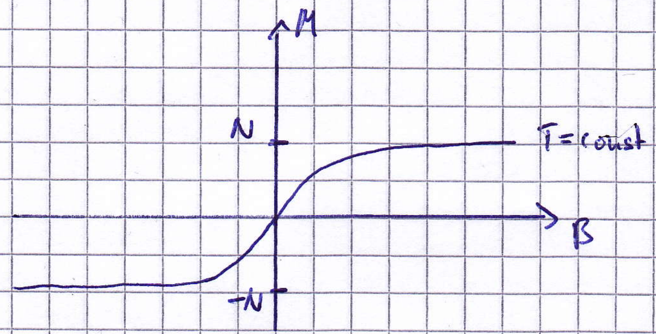
$$= \sum_{S_1 \in \{-1,1\}} e^{\beta B S_1} \cdot \ldots \cdot \sum_{S_N \in \{-1,1\}} e^{\beta B S_1} = (e^{\beta B} + e^{-\beta B})^N$$

$$= 2^N \cosh(\beta B)^N$$

b) $F = -k_B T \ln(Z_N) - k_B T (\ln(2^N \cosh(\beta B))^N) = -k_B N T \left[\ln(2) + \ln(\cosh(\beta B))\right]$

c) $M = \sum_{i=1}^{N} S_i$

$$M = -\frac{\partial F}{\partial B} = k_B N T \frac{1}{\cosh(\beta B)} \cdot \sinh(\beta B) \cdot \underbrace{\beta}_{=\frac{1}{k_B T}} = N \tanh(\beta B)$$



d) $\chi = \frac{\partial M}{\partial B}\Big|_{B=0} = N \frac{\partial}{\partial B} \frac{\sinh(\beta B)}{\cosh(\beta B)} = N \left(\beta \cdot \frac{\cosh^2(\beta B)}{\cosh^2(\beta B)}\Big|_{B=0} - \beta \underbrace{\frac{\sinh^2(\beta B)}{\cosh^2(\beta B)}\Big|_{B=0}}_{=0} \right)$

$$= \beta N$$

4

TuS Blatt 11 19.01.12

$\boxed{A\ 11.1}$

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N \quad , \quad Q_N = \int d^{3N}p \, d^{3N}q \, e^{-\beta H}$$

$$\langle N \rangle = z \frac{\partial}{\partial z} \operatorname{Log}(\mathcal{Z}) \Rightarrow \langle N^2 \rangle = \frac{\sum_{N=0}^{\infty} N^2 z^N Q_N}{\sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N}$$

$$\langle N \rangle = \frac{\sum_{N=0}^{\infty} N z^N Q_N}{\sum_{N=0}^{\infty} z^N Q_N}$$

$$\frac{\partial \langle N \rangle}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \underset{\text{Fugazität}}{z} \frac{\partial}{\partial z} \log(\mathcal{Z}) = \frac{\sum N^2 z^{N-1} Q_N \cdot \sum z^N Q_N - \sum N z^N Q_N \sum N z^{N-1} Q_N}{(\sum z^N Q_N)^2}$$

$$\Rightarrow z \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial z} = \frac{\sum N^2 z^N Q_N \cdot \sum z^N Q_N - \sum N z^N Q_N \sum N z^N Q_N}{(\sum z^N Q_N)^2}$$

$$= \boxed{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = z \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial z} \operatorname{Log}(\mathcal{Z})}$$

z.z.: $\lim_{N \to \infty} \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = 0$

$$\frac{pV}{k_B T} = \log(\mathcal{Z}) \Rightarrow z \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial z} \log(\mathcal{Z}) = k_B T V \frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2}$$

$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}$, $p = -\frac{\partial F}{\partial V}$, $F = N \cdot a(v)$, da F extensive Größe , $v = \frac{V}{N}$

$$\mu = a(v) - v \frac{\partial a(v)}{\partial v} \Rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial v} = -v \frac{\partial^2 a(v)}{\partial v^2} \quad , \quad \frac{\partial p}{\partial \mu} = \frac{\frac{\partial p}{\partial v}}{\frac{\partial \mu}{\partial v}} = \frac{1}{v}$$

$$p = -\frac{\partial a(v)}{\partial v}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} = -\frac{1}{v^2} \cdot \frac{\partial v}{\partial \mu} = \frac{1}{v^3 \frac{\partial^2 a}{\partial v^2}} = -\frac{1}{v^3} \frac{1}{\frac{\partial p}{\partial v}}$$

$$K_T = -\frac{1}{v \frac{\partial p}{\partial v}} \quad , \quad \frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} = \frac{K_T}{v^2}$$

$$\Rightarrow \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = k_B T V \frac{K_T}{v^2} = N \frac{k_B T K_T}{v}$$

$\boxed{A\ 11.3}$ $E = -\varepsilon \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1}$, $n = \sum_{i=1}^{N} S_i$

$Z = \sum_{\{S\}} e^{(n\mu - E)\beta}$

$\sigma_i = 2S_i - 1 \Rightarrow E = -\frac{\varepsilon}{4} \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i + 1)(\sigma_{i+1} + 1)$

$n = \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i + 1) \cdot \frac{1}{2}$

$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(\beta\left(\frac{\varepsilon}{4} \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i + 1)(\sigma_{i+1} + 1) + \frac{1}{2}\mu \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i + 1)\right)\right)$

$= \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(\beta\left(\frac{\varepsilon}{4} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} + \left(\frac{\mu}{2} + \frac{\varepsilon}{2}\right) \sum_i \sigma_i + N\left(\frac{\varepsilon}{4} + \frac{N}{2}\right)\right)\right)$

$E = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_i \sigma_i$, $J = \frac{\varepsilon}{4}$, $H = \frac{\mu}{2} + \frac{\varepsilon}{2}$, $\varepsilon = 4J$, $\mu = 2H - 4J$

Druck: $p = \frac{1}{N\beta} \ln(Z)$

$f = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \ln(Z)$

$p = -f + H - J$

Dichte: $\rho = \frac{\langle n \rangle}{N} = \frac{\partial p}{\partial \mu} = \frac{\partial(-f + H - J)}{\partial(2H - 4J)} = -\frac{\partial f}{\partial(2H - 4J)} + \frac{\partial(H - J)}{\partial(2H - 4J)}$

$= -\frac{\partial f}{\partial(2H - 4J)} + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} + \frac{M}{2}$, $M = -\frac{\partial f}{\partial H}$

$\kappa_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mu} = \frac{1}{4\rho^2} \chi$ $\quad \left(\chi = \frac{\partial M}{\partial H}\right)$