# Lösungssammlung Übungsblätter Theo IV
# Blatt 5

Luc Kusters

WS 19/20

Die Lösungen die hier zusammengefasst wurden, kommen großenteils von Oliver Liang Wen, obwohl ich selber einige Sachen hinzugefügt habe. Ich möchte mich insbesondere für seine gute und regelmäßige festlegung der Übungsgruppenmitschriften bedanken, ohne welches dieses Projekt gar nicht möglich wäre.

Die Lösungen gehören zu den Übungsblätter der von V. Meden gehaltene Vorlesung zur theoretische Physik IV: Statistische Physik und Thermodynamik an der RWTH Aachen, WS19/20.

**Weder absolute Vollständichkeit noch absolute Korrektheit kann garrantiert werden!** Bei Anmerkungen, Fragen, Korrekturen oder sonstiges, könnt ihr mich gerne per email erreichen:
ljbkusters@gmail.com

1. **Reißverschlussmodel eines DNS-Moleküls**

a) Bestimme die kanonsiche Zustandssumme Z.

Gäbe es N bindungen, wobei 1 Bindung immer geschlossen ist. Sei die Energie einer offene Bindung $\epsilon$ und die Energie einer geschlossenen Bindungen 0. Gäbe es weiter $p$ offene Bindungen ($p \in [0, \dots, N-1]$). Die Gesammtenergie des Systems ist gegeben durch $E = p\epsilon$.

Ein Zustand entspricht eine kombination von offenen und geschlossenen Bindung. Weil Bindung $n$ erst schließen kann, wenn Bindung $n-1$ geschlossen ist, werden alle Zustände einfach gegeben durch die Anzahl der offenen Bindungen und braucht man keine sich nicht um Permutationen von offenen und geschlossenen Bindungen zu kummern.

$$Z = \sum_r e^{-\beta E_r} = \sum_{p=1}^{N-1} e^{-\beta p\epsilon}$$

Man erinnere sich an die endliche geometrische Reihe:

$$\sum_{i=1}^{N} x^{i-1} = \sum_{i=0}^{N-1} x^i = \frac{1-x^N}{1-x}$$

Und setzt: $i \to p \Rightarrow x^p = e^{-\beta p\epsilon} = \left(e^{-\beta\epsilon}\right)^p$

Es folgt:

$$Z = \sum_{p=0}^{N-1} x^p \quad x = e^{-\beta\epsilon} \Leftrightarrow Z = \frac{1-e^{-\beta\epsilon N}}{1-e^{-\beta\epsilon}}$$

b) Gebe $\langle p \rangle$ als funktion von $x = e^{-\beta\epsilon}$

Nach Definition: $\langle p \rangle = \dfrac{1}{Z}\displaystyle\sum_{p=0}^{N-1} pe^{-\beta\epsilon p}$

Man bemerke: $pe^{-\beta\epsilon p} = -\dfrac{1}{\epsilon}\dfrac{\partial}{\partial\beta}e^{-\beta\epsilon p}$

Es folgt:

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \frac{1}{Z}\sum_{p=0}^{N-1} pe^{-\beta\epsilon p} = \frac{-1}{Z\epsilon}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_{p=0}^{N-1} e^{-\beta\epsilon p} \\
&= \frac{-1}{Z\epsilon}\frac{\partial}{\partial\beta}Z(\beta,\epsilon,N) \\
&= \frac{1}{Z}\left(\frac{-Nx^N}{1-x} + \frac{(1-x^N)x}{(1-x)^2}\right) \\
&= \frac{-Nx^N}{1-x^N} + \frac{x}{1-x}
\end{aligned}$$

c) Bestimme $\langle p\rangle/N$ für $N \gg 1$ bei $x < 1$ und $x > 1$. Skizzire $\langle p\rangle/N(x)$ und gebe eine physikalische Interpretation.

$$\frac{\langle p\rangle}{N} = \frac{1}{N}\frac{x}{1-x} - \frac{x^N}{1-x^N}$$

Man bemerke dass für alle $x$: $\frac{1}{N}\frac{x}{1-x} \overset{N\to\infty}{\to} 0$

Es folgt für große N, dass:

$$\frac{\langle p\rangle}{N} = \frac{1}{N}\frac{x}{1-x} - \frac{x^N}{1-x^N} \approx -\frac{x^N}{1-x^N}$$

für $x < 1$: $x^N \overset{N\to\infty}{\to} 0$
für $x > 1$: $x^N \overset{N\to\infty}{\to} \infty \gg 1 \Leftrightarrow -\frac{x^N}{1-x^N} \approx \frac{x^N}{x^N} = 1$

Dass heisst, dass $\frac{\langle p\rangle}{N}$ einen Stufen-Funktion bildet im Limes von $N \to \infty$.

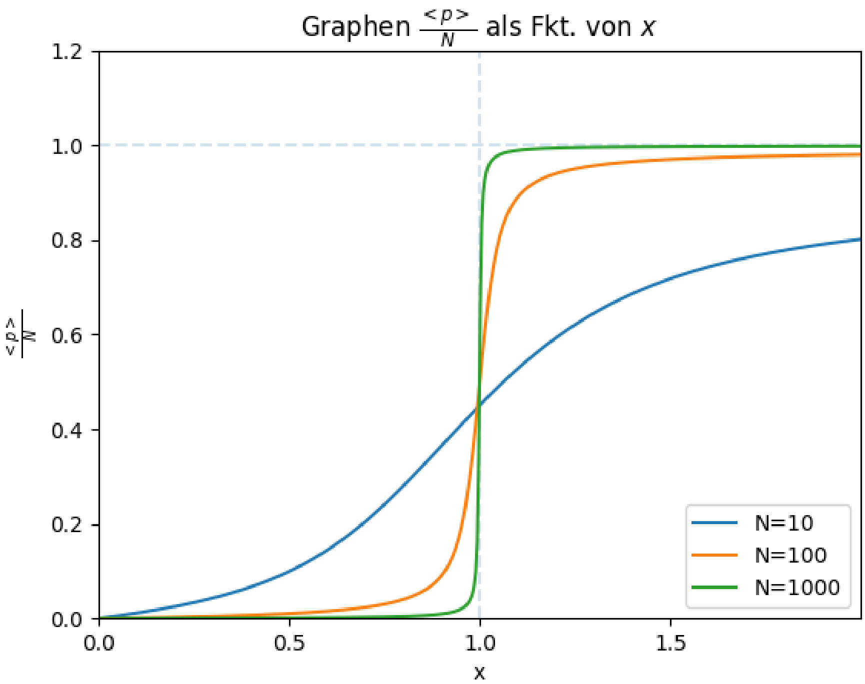


Abbildung 1: $\frac{\langle p\rangle}{N}(x)$ für verschiedene $N$. $x < 1$: Gebundene Zustände, $x > 1$ Offene Zustände

Physikalische interpretation: die Bindungen öfnen sich spontan ab eine bestimmte Temperatur (genau dann wenn $x = 1 \Leftrightarrow \epsilon \ll k_B T$).

2. **N ungekoppelte Spins im Magnetfeld II**

a) ZZ: Kanonische Zustandssumme hat die Form $Z = (Z_0)^N$. Berechne $Z_0$.

Man erinnere sich dass die Energie eines Spins im Magnetfeld durch $\epsilon = -2\mu_0 Bs$ ist. Für ein Ensemble aus Spins wird die Gesammtenergie gegeben durch:

$$E_r = \sum_i \epsilon_i = -2\mu_0 B \sum_i s_i := -\mu_0 B m_r = -\mu_0 B(2N_- - N)$$

Dabei ist $N = N_+ + N_-$ und $m = N_+ - N_-$ wobei $N_\pm$ die Anzahl der $\pm\frac{1}{2}$ Spins ist. Es gibt für gegebenen $N_-$, bzw. $N_+$, $\binom{N}{N_-} = \binom{N}{N_+}$ Zustände gleicher Energie in dem sich das System befinden kann.

Für die kanonsiche Zustandssumme flogt jetzt:

$$\begin{aligned}
Z = \sum_r e^{-\beta E_r} &= \sum_{N_-=0}^{N} \binom{N}{N_-} e^{-\beta\mu_0 B(2N_- - N)} \\
&= \sum_{N_-=0}^{N} \binom{N}{N_-} e^{-\beta\mu_0 BN_-} e^{-\beta\mu_0 B(N_- - N)} \\
&= \sum_{N_-=0}^{N} \binom{N}{N_-} \left(e^{-\beta\mu_0 B}\right)^{N_-} \left(e^{-\beta\mu_0 B}\right)^{N_- - N} \\
&= \sum_{N_-=0}^{N} \binom{N}{N_-} \underbrace{\left(e^{-\beta\mu_0 B}\right)^{N_-}}_{q^{N_-}} \underbrace{\left(e^{\beta\mu_0 B}\right)^{N - N_-}}_{p^{N-N_-}} \rightarrow \text{Binomische Formel} \\
&= (e^{\beta\mu_0 B} + e^{\beta\mu_0 B})^N \\
&= (2\cosh(\beta\mu_0 B))^N
\end{aligned}$$

Alternative Lösungsweg:

$N = 1$

$$Z_1 = \sum_{s_1=\pm\frac{1}{2}} e^{-2\beta\mu_0 Bs_1} = e^{-\beta\mu_0 B} + e^{-\beta\mu_0 B} = 2\cosh(\beta\mu_0 B) := Z_0$$

$N = 2$

$$\begin{aligned}
Z_2 &= \sum_{s_2=\pm\frac{1}{2}} \sum_{s_1=\pm\frac{1}{2}} e^{-2\beta\mu_0 B(s_1+s_2)} \\
&= \sum_{s_2=\pm\frac{1}{2}} \sum_{s_1=\pm\frac{1}{2}} e^{-2\beta\mu_0 Bs_1} e^{-2\beta\mu_0 Bs_2} \\
&= \sum_{s_1=\pm\frac{1}{2}} e^{-2\beta\mu_0 Bs_1} \sum_{s_2=\pm\frac{1}{2}} e^{-2\beta\mu_0 Bs_2} \\
&= Z_0 \cdot Z_0 = Z_0^2
\end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow Z_N = Z_0^N$$

Dies ist gültig für alle N (leicht nachzuschauen, aber Beweis "eigentlich" nur mit vollständige Induktion zu geben, doch bekam man natürlich auch ohne V.I. dafür die volle Punktzahl).

b) Berechne $\langle s_i \rangle$ sowie $\Delta s_i^2 = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)^2 \rangle$

Nach Definition: $\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_r s_i e^{-\beta E_r}$

Mit der Zweite Lösung aus (a) folgt:

$$\begin{aligned}
\langle s_i \rangle &= \frac{1}{Z_N} \prod_{j=1}^{N} \sum_{s_j=\pm 1/2} s_i e^{-2\beta\mu_0 B s_j} \\
&= \frac{1}{Z_N} \sum_{s_1=\pm 1/2} e^{-2\beta\mu_0 B s_1} \dots \sum_{s_i=\pm 1/2} s_i e^{-2\beta\mu_0 B s_i} \dots \sum_{s_N=\pm 1/2} e^{-2\beta\mu_0 B s_N} \\
&= \frac{1}{\cancel{Z_0^N}} \left( \cancel{Z_0^{N-1}} \right) \sum_{s_i=\pm 1/2} s_i e^{-2\beta\mu_0 B s_i} \\
&= -\frac{1}{Z_0 \mu_0 B} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{s_i=\pm 1/2} e^{-2\beta\mu_0 B s_i} \\
&= -\frac{1}{Z_0 \mu_0 B} \frac{\partial}{\partial \beta} Z_0(\beta, B) = \frac{\sinh \beta\mu_0 B}{2 \cosh \beta\mu_0 B} \\
&= \frac{\tanh(\beta\mu_0 B)}{2}
\end{aligned}$$

Analog findet man $\langle s_i^2 \rangle$ (für $\Delta s_i^2$)

$$\begin{aligned}
\langle s_i^2 \rangle &= \frac{1}{Z_0^N} \left( Z_0^{N-1} \right) \sum_{s_i=\pm 1/2} s_i^2 e^{-2\beta\mu_0 B s_i} \\
&= \frac{1}{Z_0 \mu_0^2 B^2} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \sum_{s_i=\pm 1/2} e^{-2\beta\mu_0 B s_i} \\
&= \frac{1}{4}
\end{aligned}$$

Es folgt: $\Delta s_i^2 = \langle s_i^2 \rangle - \langle s_i \rangle^2 = \frac{1}{4}(1 - \tanh^2(\beta\mu_0 B))$

c) Berechne $\langle s_i s_j \rangle$ sowie $\langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle$ $(i \neq j)$

analog zu (b) folgt:

$$\begin{aligned}
\langle s_i s_j \rangle &= \frac{1}{Z_0^N} \left( Z_0^{N-2} \right) \sum_{s_i=\pm 1/2} s_i e^{-2\beta\mu_0 B s_i} \sum_{s_j=\pm 1/2} s_j e^{-2\beta\mu_0 B s_j} \\
&= \frac{1}{Z_0^2 \mu_0^2 B^2} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{s_i=\pm 1/2} e^{-2\beta\mu_0 B s_i} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{s_j=\pm 1/2} e^{-2\beta\mu_0 B s_j} \\
&= \frac{1}{Z_0^2 \mu_0^2 B^2} \left( \frac{\partial}{\partial \beta} Z_0(\beta, B) \right)^2 \\
&= \frac{\tanh^2(\beta\mu_0 B)}{4}
\end{aligned}$$

Für $\langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle$ folgt:

$$\langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \frac{\tanh^2(\beta\mu_0 B)}{4} - \left( \frac{\tanh(\beta\mu_0 B)}{2} \right)^2 = 0$$

d) Vergleiche (c) mit 2.3.e und 2.3.f

In Aufgabe 2.3.e und f (mikrokanonische Rechnung) war die Korrelation nicht 0, es gab also eine Korrelation zwischen den Spins. Jetzt ist die Korrelation 0, es gibt also keinen Korrelation zwischen den Spins. Dies ist leicht zu erklären, denn in 2.3 war die Magnetisierung vorgegeben ($m$ fest), und die Zustand eines Spins vergrößte die Wahrscheinlichkeit einen anderen Spin in die umgekehrte Richtung zu finden. Jetzt ist aber $T$ die vorgegebene Parameter ($T$ fest, $m$ frei), und $T$ ist unabhängig vom Spin bzw. Magnetisierung, und somit hängt Wahrscheinlichkeit ein Spin in eine Zustand zu finden nicht von die Magnetisierung ab.

3. **Harmonische Oszillatoren**

a) Bestimme Gesammtenergie $E_n$ in Zustand $|n\rangle$

Es gilt:
$\hat{\mathbf{H}}\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle$
$\hat{\mathbf{H}}\,|n_i\rangle = \epsilon_{n,i}\,|n_i\rangle$ mit $\epsilon_{n_i,i} = \hbar\omega(n_i + \frac{1}{2})$ und
$|n\rangle = |n_1\rangle \times |n_2\rangle \times \ldots \times |n_N\rangle$

Es folgt:

$$E_n = \sum_i \epsilon_{n_i,i} = \hbar\omega \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2}\right) \quad n = (n_1, \ldots, n_N)$$

b) Bestimme die kanonischen Zustandssumme Z

$$Z = \prod_{j=1}^{N} \sum_{n_j=1}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n_j + \frac{1}{2})}$$

Man erinnere sich an die "vollständige" geometrische Reihe:

$$\sum_{i=1}^{\infty} x^i = \frac{1}{1-x} \quad \text{für } x < 1$$

Und man bemerke, dass wegen $\epsilon_n > 0\ \forall\, n \Leftrightarrow e^{-\beta\epsilon_n} < 1\ \forall\, n$

Es folgt für Z:

$$\begin{aligned}
Z &= \prod_{j=1}^{N} \sum_{n_j=1}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n_j + \frac{1}{2})} \\
&= \left(\sum_{n}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n + \frac{1}{2})}\right)^N \\
&= e^{-\beta\hbar\omega N/2}\left(\sum_{n}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n}\right)^N \\
&= e^{-\beta\hbar\omega N/2}\left(\frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}\right)^N \\
&= (Z_0)^N = (2\sinh(\hbar\omega\beta/2))^N
\end{aligned}$$

c) Bestimme die Freie energie F

Nach defnition: $F = -k_B T \ln Z$

Es folgt für F:

$$\begin{aligned}
F &= -Nk_B T \ln\left(e^{-\beta\hbar\omega/2}\left(\frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}\right)\right) \\
&= -Nk_B T\left(\ln\left(e^{-\beta\hbar\omega/2}\right) + \ln\left(\frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}\right)\right) \\
&= -Nk_B T\left(-\beta\hbar\omega/2 - \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)\right) \\
&= \frac{N\hbar\omega}{2} + Nk_B T \ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)
\end{aligned}$$

d) Zeige mit $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ daß $\langle E\rangle = F + TS$

Hergeleitet im Vorlesung/Skript: $\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}Z$

$$\begin{aligned}
\langle E\rangle &= -\frac{\partial}{\partial\beta}Z \\
&= -\frac{\partial T}{\partial\beta}\frac{\partial}{\partial T}Z \\
&= -\frac{T}{\beta}\frac{\partial}{\partial T}Z\frac{1}{\beta}Z - \frac{1}{\beta}Z \\
&= -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial T}(T\ln Z)\underbrace{-\frac{\ln Z}{\beta}}_{=F} \\
&= F + T\frac{\partial}{\partial T}(k_B T\ln Z) \\
&= F - T\frac{\partial}{\partial T}(F) \\
&= F + TS
\end{aligned}$$

e) Bestimme die Entropie $S$, die innere Energie $\langle E\rangle$, die mittlere Zahl von Oszillatorquanten $\langle n_i\rangle$ pro Oszillator. Drücke $\langle E\rangle$ in $\langle n_i\rangle$ aus.

$$\begin{aligned}
S &= k_B\ln Z + k_B T\frac{\partial}{\partial T}\ln Z \\
&= -Nk_B\ln(1-\exp(-\hbar\omega\beta)) + k_B\beta N\hbar\omega\frac{e^{-\hbar\omega\beta}}{1-e^{-\hbar\omega\beta}} \\
\langle E\rangle &= \frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = \frac{N\hbar\omega}{2} + \frac{N\hbar\omega}{e^{-\hbar\omega\beta}-1} \\
\langle n_i\rangle &= \frac{1}{Z}n_i\prod_{j}^{N}\sum_{n_j=0}^{\infty}e^{-\beta\epsilon_{n_j}} \\
&= \frac{1}{Z_0^N}Z_0^{N-1}\sum_{n_i=0}^{\infty}n_i e^{-\beta\epsilon_{n_i}} \\
&= \frac{1}{Z_0}\sum_{n_i=0}^{\infty}n_i e^{-\beta\hbar\omega(n_i+\frac{1}{2})} \\
&= \frac{1}{Z_0}e^{-\beta\hbar\omega/2}\sum_{n_i=0}^{\infty}n_i e^{-\beta\hbar\omega n_i} \\
&= -\frac{1}{Z_0\hbar\omega}e^{-\beta\hbar\omega/2}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \\
&= \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}+1} \quad \text{(Bose-Einstein)} \\
\Leftrightarrow \langle E\rangle &= N\hbar\omega\left(\langle n_i\rangle + \frac{1}{2}\right) \Leftrightarrow \frac{\langle E\rangle}{N} = \langle\epsilon_i\rangle = \hbar\omega\left(\langle n_i\rangle + \frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

f) Zeige, dass für die spezifische Wärme C gilt: $C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$ Was ergibt sich für T groß bzw. klein?

Es gilt nach der Vorlesung/dem Skript: $C_x = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_x$

$$C = T\frac{\partial S}{\partial T} = Nk_B\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega\beta}}{\left(e^{\hbar\omega\beta}-1\right)^2} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

Für $T$ groß: $C \to Nk_B$ $(k_B T \gg \hbar\omega)$
Für $T$ klein: $C \to 0$ $(k_B T \ll \hbar\omega)$

4. **Allgemeines Gas im kanonischen Ensemble** Allgemeines: $H = D|\mathbf{p}|^\alpha \quad T, V$

a) Berechne $Z_{\text{kan}}(T, V, N)$, $F(T, V, N) = -k_B T \ln Z$ sowie $S(T, V, N) = -\frac{\partial F}{\partial T}$ und bestimme die kalorische und thermische Zustandsgleichungen.

$$\begin{aligned}
Z &= \frac{1}{h^{3N}} \int e^{-\beta H} d^{3N}p d^{3N}x \\
&= \frac{1}{h^{3N}} \int e^{-\beta |p|^\alpha} d^{3N}p d^{3N}x \\
&= \frac{1}{h^{3N}} \frac{1}{N!} \left( \int e^{-\beta D |p|^\alpha} d^3p d^3x \right)^N = \frac{Z_0^N}{N!} \quad \text{(Keine WW)} \\
Z_0 &= \frac{V}{h^3} \int e^{-\beta D |p|^\alpha} d^3p d^3x \\
&= \frac{V}{h^3} \int e^{-\beta D |p|^\alpha} d^3p \\
&= \frac{V}{h^3} \int e^{-\beta D \left(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2\right)^{\alpha/2}} d^3p \\
&= \frac{4\pi V}{h^3} \int_0^\infty r^2 e^{-\beta D r^\alpha} dr \\
&= \frac{4\pi V}{h^3} \frac{1}{\alpha (\beta D)^{3/\alpha}} \Gamma(3/\alpha) \\
Z &= \frac{1}{N!} \left[ \frac{4\pi V}{h^3} \frac{1}{\alpha (\beta D)^{3/\alpha}} \Gamma(3/\alpha) \right]^N
\end{aligned}$$

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \left[ -\ln N! + N \ln \left( \frac{4\pi V}{\alpha D^{3/\alpha}} \right) + N \ln \left( \Gamma \left( \frac{3}{\alpha} \right) \right) + \frac{3N}{\alpha} \ln (k_B T) \right]$$

$$\begin{aligned}
S &= -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{F}{T} + 3 \frac{N k_B}{\alpha} \quad \text{kalorische Zstd.Gl.} \\
P &= -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{N k_B T}{V} \quad \text{thermische Zstd.Gl.}
\end{aligned}$$

b) Vergleiche die Ergebnisse zu Entropie und Zustandsgleichung für $\alpha = 2$ und $D = \frac{1}{2m}$ mit Resultate aus der mikrokankanonische Rechnung.

$$S_{\text{mk}} = N k_B \left( \ln \left( \tilde{C} \right) + \ln \left( \frac{E}{N} \right) + \ln \left( \frac{V}{N} \right) \right)$$

$$N! \approx N \ln N - N$$

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} N k_B T$$

c) $\alpha = 1$ entspricht einem relativistischen id. Gas. Diskutiere die Ergebnisse. Welche Bedeutung hat $D$?

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \approx p^2 c^2 \quad D = c$$

$$H = pc$$

$$PV = N k_B T \quad E = 3 N k_B T \quad S \propto \ln T^3$$