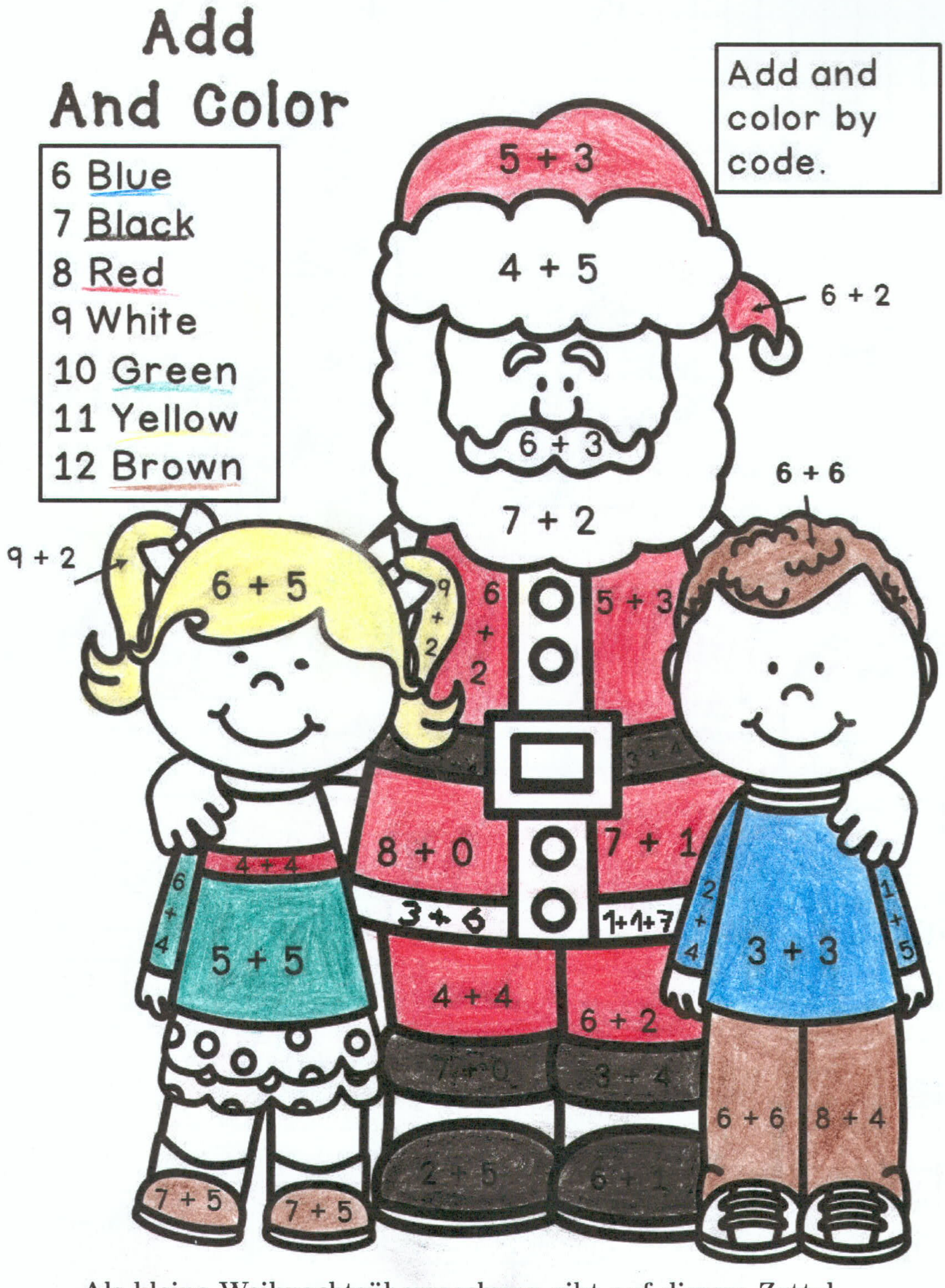
David
Lars
Yascha
Jonah

Thermodynamik und Statistik — WiSe 2018/2019

12. Übungsblatt

Ausgabe: 20.12.2018
Abgabe: 10.01.2019 18 Uhr



Als kleine Weihnachtsüberraschung gibt auf diesem Zettel ab 8 Punkten jeder weitere Punkt einen Bonuspunkt! (Für 11 erreichte Punkte bedeutet das beispielsweise +3 Bonuspunkte.)

A1	A2	A3	A4	Ges
0,5	2,5	3,5	4	10,5 → 13

1) b) $\beta \Phi = \pm \frac{V}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d\vec{p} \, \ln\left(1 \mp z e^{-\beta E(\vec{p})}\right)$

$$E = c\,|\vec{p}|^{\nu} \iff |\vec{p}| = \left(\frac{E}{c}\right)^{\frac{1}{\nu}}$$

$$dE = c\nu\,|\vec{p}|^{\nu-1}\, d|\vec{p}|$$

$$d^d\vec{p} = \Omega_d(1)\,|\vec{p}|^{d-1}\, d|\vec{p}|$$

$$= \frac{\Omega_d(1)}{c\nu}\,|\vec{p}|^{d-\nu+1}\, dE$$

$$= \frac{\Omega_d(1)}{c\nu}\left(\frac{E}{c}\right)^{\frac{d-\nu+1}{\nu}} dE$$

$$\Rightarrow \int d^d p \ln\left(1 \mp z e^{-\beta E(\vec{p})}\right) = \int dE\, \frac{\Omega_d(1)}{c\nu}\left(\frac{E}{c}\right)^{\frac{d-\nu+1}{\nu}} \ln\left(1 \mp z e^{-\beta E}\right)$$

$$= \int d|\vec{p}|\, \underbrace{\frac{\Omega_d(1)}{c\nu}}_{\text{setze } 1}\, |\vec{p}|^{d-1} \ln\left(1 \mp z e^{-\beta c |\vec{p}|^{\nu}}\right)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{d}\,|\vec{p}|^{d} \ln\left(1 \mp z e^{-\beta c|\vec{p}|^{\nu}}\right)\Big|_0^{\infty}}_{0} - \int d|\vec{p}|\, \frac{1}{d}\,|\vec{p}|^{d} \cdot \left(\frac{\beta c \nu z |\vec{p}|^{\nu-1}}{e^{\beta c|\vec{p}|^{\nu}} \pm z}\right)$$

! sah bis dahin eigentlich nicht schlecht aus.

0,5/4

2)

a) Zustände mit Energieeigenwerten ε

$|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}$; $|1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}$; $|2\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}$; $|3\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$

$\varepsilon_1 = 0$; $\varepsilon_2 > 0$; $\varepsilon_2 > 0$; $\varepsilon_3 > \varepsilon_2$

$$\Rightarrow \hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}$$

✓

Keine Übergangswahrscheinlichkeit

~~⇒ Keine Über~~

$\Rightarrow \frac{d\hat{\rho}}{dt} = 0 \Rightarrow [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0 \Rightarrow$ gemeinsames System von Eigenzuständen

$$\Rightarrow \hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_3 \end{pmatrix}$$

mit ρ_i als Wahrscheinlichkeit das System in Zstd $|i\rangle$ zu finden.

$\hat{\rho} = \frac{1}{Z_k} e^{-\beta \hat{H}}$ mit $Z_k = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta \hat{H}}\right)$ (1)

b) $T \to 0 \Rightarrow$ Energie ins niedrigste Niveau (ε_1)

$\to$ Zustand $|0\rangle$ hat Wahrscheinlichkeit $\rho_0 = 1$

$\to \rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = 0$

$\to \hat{\rho} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ $\to \hat{\rho}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ $\Rightarrow \hat{\rho}$ = reiner Zstd.

$T \to \infty \Rightarrow$ Energie ins höchste Niveau (ε_3) f

$\to$ Zustand $|3\rangle$ hat Wahrscheinlichkeit $\rho_3 = 1$

$\to \rho_0 = \rho_1 = \rho_2 = 0$

dabei hilft es (1) richtig zu berechnen.

$\to \hat{\rho}(T \to \infty) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (\hat{\rho}(T \to \infty))^2 \Rightarrow$ reiner Zustand f

c)
$\langle S\rangle = -k_B \sum_m \rho_m \ln \rho_m$ $\langle E\rangle = \sum_m \rho_m E_m$

$T=0 \Rightarrow S = -k_B \underbrace{\ln 1}_{0} - 3k_B \underbrace{\text{„}0\ln 0\text{"}}_{0} = 0$ ✓

$E_1 = 1\varepsilon_1 + 0(\varepsilon_2+\varepsilon_2+\varepsilon_3)$ ✓

$T \to \infty$

$S = -k_B \text{ „}0\ln 0\text{"} - k_B \ln 1 = 0$ ff.

$E = 0(\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_2) + 1\varepsilon_3 = \varepsilon_3$ ff.

d) Quantenmechanik ist komisch (außer bei T=0). Ja schon irgendwie :)

Für $T \to 0$ geht die kinetische Energie der Teilchen ebenfalls gegen den niedrigsten Energieeigenwert (hier 0) Da sich bei T=0 nichts bewegt (reiner Zustand) und somit nicht andere Zustände erreicht werden können ist die Entropie S=0 ✓

($T \to \infty$) E und S?

2,5/4

④

4) $E_{\vec{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sigma \mu_B g B$

Anmerkung: Falls das B-Feld bereits eingeschaltet sein sollte, muss noch $\sigma\mu_B g B$ abgezogen werden
$\Rightarrow E \to E_{eff} = E - \sigma \mu_B g B$ ja, passt schon :)

a) $g(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \underbrace{d^3k}_{4\pi k^2 dk} \, \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$

$= \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty dk \, k^2 \, \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)$

$= \frac{Vm\lambda}{2\pi^2 \hbar^2} \int_0^\infty dk \, k \left(\delta\left(k - \frac{1}{\lambda}\right) + \delta\left(k + \frac{1}{\lambda}\right)\right)$

$= \frac{mV}{2\pi^2 \hbar^2} \frac{\lambda}{\lambda^2} = \frac{V m^{3/2} \sqrt{E}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3}$ ✓

$\boxed{\begin{array}{l} \delta(g(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|} \\ g(k) = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \overset{!}{=} 0 \\ \Rightarrow k_{1/2} = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \pm \frac{1}{\lambda} \\ g'(k_{1/2}) = \mp \frac{\hbar^2}{m\lambda} \end{array}}$ ✓ wichtige Relation :) ✓

b) $M = \frac{\mu_B}{V}(N_\uparrow - N_\downarrow)$ $\quad T \to 0, \beta \to \infty, f(E) \to \Theta(E - \mu), f'(E) \to \delta(E - \mu), \mu \to E_F$

$N_{\uparrow\downarrow}$ $N_\sigma = N_\pm = \sum_k f(E_{k\sigma}) \to \int_{-\infty}^{\infty} dE \, g_\sigma(E \mp \mu_B g B) \, f(E)$

$= \int_{-\infty} dE \left(g_\sigma(E) \mp \mu_B g B \, g_\sigma'(E)\right) f(E)$

$\boxed{\begin{array}{l} \text{für erreichbare} \\ B: g\mu_B B \ll E_F \\ \Rightarrow g_\sigma(E \pm \mu_B g B) \\ \approx g_\sigma(E) \pm \mu_B g B \, g_\sigma'(E) \end{array}}$ *

$\Rightarrow N_\uparrow - N_\downarrow = \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-2\mu_B g B \, g_\sigma'(E)\right) f(E)$

$= -2\mu_B g B \int_{-\infty}^{\infty} dE \, g_\sigma'(E) f(E) = -2\mu_B g B \left(\underbrace{\left[g_\sigma(E) f(E) \right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} g_\sigma(E) f'(E) \right)$

$\overset{T\text{-lim}}{=} 2\mu_B g B \int_{-\infty}^{\infty} g_\sigma(E) \, \delta(E - E_F) \, dE$

$g_\sigma(E) = g(E_{eff})$

$= 2\mu_B g B \, g_\sigma(E_F) = 2\mu_B g B \frac{V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E_F \mp \mu_B g B}$

$\Rightarrow M = \frac{\mu_B^2 g B m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2(E_F \mp \mu_B g B)}$ (✓) (nach eurer Rechnung okay)

c) $\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{\mu_B^2 g m^{3/2}}{\sqrt{2}} \cdot \frac{2E_F \mp 3\mu_B g B}{\sqrt{E_F \mp \mu_B g B}}$ (✓)

* egal wie realistisch das auch sein mag, sollte eigentlich eine Fallunterscheidung $\mu \gtrless g\mu_B B$ gemacht werden

3) 3.5

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \varepsilon_2 & & \\ & & \varepsilon_2 & \\ & & & \varepsilon_3 \end{pmatrix} \quad \hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_0 & & & \\ & \rho_1 & & \\ & & \rho_2 & \\ & & & \rho_3 \end{pmatrix}$$

$$Z_k = \sum_l Z_m(\varepsilon_l) e^{-\beta \varepsilon_l} \qquad Z_m(\varepsilon_l) = Tr\left(\sum_{n=1}^{k} |\varepsilon_l, n\rangle\langle \varepsilon_l, n|\right)$$

k: Anzahl der Zust. mit diesen EW

$$= \sum_{l=1}^{3} Z_m(\varepsilon_l) e^{-\beta\varepsilon_l} \qquad Z_m(\varepsilon_1) = Z_m(\varepsilon_3) = 1, \quad Z_m(\varepsilon_2) = 2$$

$$= 1 + 2e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-\beta\varepsilon_2}$$

b) $F = -\frac{1}{\beta}\ln(1 + 2e^{-\beta\varepsilon_2} + e^{-\beta\varepsilon_3}) = -\frac{1}{\beta}\ln Z_k = -k_B T \ln\left(1 + 2e^{-\frac{\varepsilon_2}{k_B T}} + e^{-\frac{\varepsilon_3}{k_B T}}\right)$

c) $U = -\frac{\partial}{\partial\beta}(\beta F) = \frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z_k) = + \frac{2\varepsilon_2 e^{-\frac{\varepsilon_2}{k_B T}} + \varepsilon_3 e^{-\varepsilon_2/k_B T}}{(e^{\varepsilon_2/k_B T} + 2)e^{\varepsilon_3/k_B T} + e^{\varepsilon_2/k_B T}}$

(sonst richtig)

$-S = \frac{\partial F}{\partial T}\Big|_V = -\frac{\partial F}{\partial\beta}\frac{\partial\beta}{\partial T} = -k_B\frac{\partial F}{\partial\beta} = -Tk_B^2\left(\frac{\varepsilon_3 e^{-\varepsilon_3/k_B T} + 2\varepsilon_2 e^{-\varepsilon_2/k_B T}}{e^{-\frac{\varepsilon_3}{k_B T}} + 2e^{-\varepsilon_2/k_B T} + 1}\right) + \ldots$

$\ldots + k_B T \ln\left(1 + 2e^{-\frac{\varepsilon_2}{k_B T}} + e^{-\frac{\varepsilon_3}{k_B T}}\right)$

da passt was mit den Einheiten nicht (ff)

d) $\hat{H} = \underbrace{\mu_B g \frac{B}{2}}_{\varepsilon}(\sigma_1^z + \sigma_2^z) \qquad \sigma_i^z|\uparrow\rangle_i = |\uparrow\rangle_i, \quad \sigma_i^z|\downarrow\rangle_i = -|\downarrow\rangle_i$

Mögl. Zust.: $|0\rangle = |\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2, \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2),$

$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2), \quad |3\rangle = |\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$

$$\hat{H}|0\rangle = -2\varepsilon|0\rangle, \quad \hat{H}|1\rangle = \hat{H}|2\rangle = 0, \quad \hat{H}|3\rangle = 2\varepsilon|3\rangle \Rightarrow \hat{H} = \begin{pmatrix} -2\varepsilon & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 2\varepsilon \end{pmatrix}$$

$E(T\to 0) = \varepsilon_0 = -\mu_B g B$

$E(T\to\infty) = \varepsilon_3 = \mu_B g B$ f → gegen 0?

$$\hat{\rho}_0 = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Sp(e^{-\beta H})} = \begin{pmatrix} e^{2\varepsilon\beta} & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & e^{-2\varepsilon\beta} \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2\cosh(2\varepsilon\beta) + 2}$$

$$\lim_{T\to 0} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow S = -k_B\sum_i \rho_i \ln \rho_i$$

$$S_0 = -k_B(\ln(1) + 3\cdot 0\cdot\ln 0) = 0$$

$$\rho_\infty = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \qquad S_\infty = -k_B \ln\frac{1}{4} = k_B \ln 4$$