Universität Bonn
Physikalisches Institut
Prof. Dr. J. Kroha, U. Pohl, R. Kramer

15.11.2024
Wintersemester 2024/25

Theoretische Physik IV: Statistische Physik
Übungsblatt 6

(Abgaben auf eCampus hochladbar bis 13 Uhr am 22.11.2024)

Quickies

a) Wie unterscheiden sich mikrokanonisches, kanonisches und großkanonisches Ensemble?

b) Wie berechnet man die Temperatur im mikrokanonischen Ensemble?

c) Mit welcher Wahrscheinlichkeit $W(n)$ ist ein Zustand $|n\rangle$ mit Energie E_n bei einer Temperatur $\widetilde{T}$ im kanonischen Ensemble realisiert? Wie wird die zugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilung genannt?

d) Zeigen Sie, dass die Definitionen der Temperatur in der Thermodynamik T und in der Statistik $\widetilde{T}$ äquivalent sind. Nehmen Sie dafür das Differential $\mathrm{d}S$ ins Visier.

e) Geben Sie die Zustandssumme für jedes der Ensembles aus a) an.

f) Drücken Sie die freie Energie F durch die kanonische Zustandssumme Z_c aus. Drücken Sie das großkanonische Potential Ω durch die großkanonische Zustandssumme Z_G aus.

g) Wie hängen U, F und Ω zusammen und was bedeutet dies für Rechnungen in verschiedenen Ensembles?

6.1 Fluktuationen in thermodynamischen Systemen **16 Punkte**

Im kanonischen Ensemble ist die Energie nicht mikroskopisch fixiert, sondern makroskopisch über den Erwartungswert $\langle E \rangle$. Dementsprechend ist es sinnvoll, die Breite der Wahrscheinlichkeitsverteilung im Energieraum zu untersuchen. Dazu betrachten wir das Schwankungsquadrat der Energie $(\Delta E)^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle$.

a) (4P) Zeigen Sie, dass für ein kanonisches Ensemble folgende Relation gilt:

$$(\Delta E)^2 = k_B T^2 \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_{V,N} . \tag{1}$$

Die isochore Wärmekapazität (bei konstanter Teilchenzahl) ist definiert als

$$C_V := T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N} \tag{2}$$

und gibt die Wärmemenge an, die benötigt wird um die Temperatur eines Körpers um 1K zu erhöhen.

b) (2P) Drücken Sie $(\Delta E)^2$ durch C_V aus.
Hinweis: Im kanonischen Formalismus ist die Energie $\langle E \rangle$ eine Funktion der Temperatur.

Eine Größe A ist dann extensiv, wenn sie sich additiv beim Zusammenschluss zweier Systeme verhält: $A = A_1 + A_2$. Dies ist gleichbedeutend mit $A(\alpha V) = \alpha A(V)$.

c) (1P) Zeigen Sie mithilfe der Definition (2), dass C_V eine extensive Größe ist.

d) (1P) Zeigen Sie damit, dass

$$\frac{\sqrt{(\Delta E)^2}}{\langle E \rangle} \propto \frac{1}{\sqrt{V}} . \tag{3}$$

e) (2P) Wie skaliert die relative Fluktuation dann mit der Teilchenzahl? Was gilt im thermodynamischen Limes $N \to \infty$, $V \to \infty$ mit $N/V = \text{const.}$? Vergleichen Sie mit der Energie im mikrokanonischen Ensemble.

Eine analoge Rechnung kann zur Teilchenzahl im großkanonischen Ensemble angestellt werden. Die Teilchenzahl ist dann durch $N = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}\right)_{T,V}$ gegeben, wobei Φ das großkanonische Potential ist.

f) (4P) Zeigen Sie, dass für ein großkanonisches Ensemble folgende Relationen gelten:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \mu} \right)_{T,V} = \frac{N}{V} \quad \text{und} \quad (\Delta N)^2 = k_B T \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} = k_B T V \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \mu^2} \right)_{T,V} . \tag{4}$$

g) (2P) Folgern Sie daraus, dass $(\Delta N)^2$ eine extensive Größe ist und analysieren Sie die relative Teilchenzahlfluktuation $\sqrt{(\Delta N)^2}/N$ im thermodynamischen Limes. Vergleichen Sie mit dem mikrokanonischen und dem kanonischen Ensemble.

6.2 Kanonisches Ensemble von Spin-$1/2$ Systemen **13 Punkte**

Auf dem letzten Übungsblatt haben Sie ein mikrokanonisches Ensemble von Zwei-Niveau Systemen untersucht, hier wollen wir nun das kanonische Ensemble betrachten, d.h. das Spinsystem kann Energie mit einem Wärmebad austauschen. Das System bestehe wie zuvor aus einem Gitter von N Spin-$1/2$ -Teilchen in einem Magnetfeld H. Hierbei können die Teilchen jeweils in den zwei Zuständen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ auftreten. Wir betrachten den Hamiltonian

$$\hat{\mathcal{H}} = -h \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_i \ , \quad \text{mit } \hat{\sigma}_i \left|\uparrow\right\rangle_i = \left|\uparrow\right\rangle_i \text{ und } \hat{\sigma}_i \left|\downarrow\right\rangle_i = -\left|\downarrow\right\rangle_i \ , \tag{5}$$

wobei $h = g\mu_B H$ mit $g = 2$ dem Landé-Faktor eines Spin-$1/2$ Teilchens. Die Zustandssumme Z_c ist im kanonischen Ensemble definiert durch

$$Z_c = \sum_n \mathrm{e}^{-\frac{E_n}{k_B T}}, \tag{6}$$

wobei die Summe über alle Zustände n im Ensemble läuft.

a) (3P) Zeigen Sie, dass die kanonische Zustandssumme Z_c des Ensembles gegeben ist durch

$$Z_c = \left[2\cosh\left(\frac{h}{k_B T}\right)\right]^N \tag{7}$$

b) (3P) Berechnen Sie die freie Energie $F = -k_B T \ln Z_c$ und die Entropie $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_h$.

c) (3P) Zeigen Sie, dass der Erwartungswert des Spinoperators $\hat{\sigma}_i$ gegeben ist durch

$$\langle \hat{\sigma}_i \rangle = \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{h}{k_B T}\right] \tag{8}$$

Argumentieren Sie, dass die Magnetisierung im Ensemble durch $M = N\langle\hat{\sigma}_i\rangle$ gegeben ist.

d) (2P) Berechnen Sie die Magnetisierung $M = -\left(\frac{\partial F}{\partial h}\right)_T$ und vergleichen Sie mit Ihrem Ergebnis aus c).

e) (2P) Berechnen Sie die magnetische Suszeptibilität $\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial h}\right)_T$ und diskutieren Sie deren Temperaturabhängigkeit bei $h = 0$.

6.3 Kühlung durch adiabatische Entmagnetisierung **11 Punkte**

Wir wollen in dieser Aufgabe untersuchen, was passieren kann, wenn das Spinsystem aus 6.2 an ein Wärmebad gekoppelt ist. Sie haben in Aufgabe 6.2 gezeigt, dass die Entropie des Spinsystems gegeben ist durch

$$S(h,T) = Nk_B \left[\ln\left(2\cosh\left(\frac{h}{k_BT}\right)\right) - \frac{h}{k_BT}\tanh\left(\frac{h}{k_BT}\right)\right] \tag{9}$$

a) (2P) Das Spinsystem werde bei angelegtem Magnetfeld $h_1 > 0$ durch Kopplung an ein Wärmebad auf die Temperatur $T_1 > 0$ gebracht und anschließend wärmeisoliert. Ändert man nun das Magnetfeld auf einen neuen Wert $h_2 > 0$, verläuft dieser Prozess adiabatisch. Was folgt daraus für die Entropie S und die Magnetisierung M?

b) (4P) Offensichtlich hängt die Entropie nur vom Verhältnis von Magnetfeld und Temperatur ab, $S(h,T) = S(h/T)$. Zeigen Sie, dass $S(h/T)$ als Funktion von $|h/T|$ injektiv ist. Was gilt also für die Temperatur T_2, die das Spinsystem nach der Magnetfeldänderung besitzt? Nehmen Sie dabei an, dass sich die Temperatur stetig mit dem Magnetfeld ändert. Wie muss h_2 gewählt werden, damit das Spinsystem abgekühlt wird, also $T_2 < T_1$ gilt?

c) (2P) Wie hängt die Orientierung der Magnetfelder h_1, h_2 mit dem Vorzeichen der Temperaturen T_1, T_2 zusammen? Was ist hier insbesondere die Bedeutung einer negativen Temperatur?

d) (3P) Betrachten Sie den Prozess, der in a) beschrieben wird, jedoch nun mit $h_2 < 0$. Wird das System danach wieder an das Bad gekoppelt, nimmt das System Energie auf oder gibt es Energie ab? (D.h. in welche Richtung fließt der Wärmestrom?)