Übung zur Vorlesung
Theoretische Physik IV

WS 2016/2017 **Blatt 7** **09.12.2016**

Aufgabe 19 *Klassisches ideales Gas im kanonischen Ensemble*

Das klassische ideale Gas setzt sich aus wechselwirkungsfreien, identischen Punktteilchen zusammen, die sich in einem Volumen V frei bewegen können. Die kinetische Energie der Teilchen ist hierbei gegeben durch

$$H = \sum_{n=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} \tag{1}$$

mit dem Impuls p_n und der Teilchenmasse m. Die Anzahl an Partikeln N sei konstant und das Gas besitze die Temperatur T. Im Folgenden soll das ideale Gas im kanonischen Ensemble untersucht werden.

a) Zeigen Sie zunächst, dass die kanonische Zustandssumme durch folgende Formel gegeben ist

$$Q_N(V,T) = \frac{1}{h^{3N}N!} V^N (2\pi m k_B T)^{3N/2} = \frac{V^N}{\lambda^{3N}N!}, \tag{2}$$

mit der De Broglie Wellenlänge $\lambda := \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$. *(2 Punkte)*

b) Die freie Energie $A = U(S,V,N) - TS$ ist die Legendre Transformierte der inneren Energie U und soll im Folgenden hergeleitet werden. Zeigen Sie, dass die freie Energie des idealen Gases folgende Form annimmt

$$A(T,V) = -k_B T \ln Q_N = -N k_B T \left[\ln \frac{V}{N\lambda^3} + 1 \right]. \tag{3}$$

(1 Punkt)

c) Leiten Sie nun mithilfe der Formel für die freie Energie die Zustandsgleichung des idealen Gases

$$pV = N k_B T \tag{4}$$

her. Verwenden Sie hierbei, dass der Druck mithilfe folgender Gleichung aus der freien Energie folgt

$$p = -\left.\frac{\partial A}{\partial V}\right|_T. \tag{5}$$

(1 Punkt)

d) Das Gas befinde sich nun in einem konservativen Kraftfeld, das aus einem skalaren Potential $\Phi(x,y,z)$ resultiert. Die Energie ist dann gegeben durch

$$H = \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} + \Phi(\mathbf{r}_n) \right) \tag{6}$$

mit dem Ortsvektor $\mathbf{r}_n$. Zeigen Sie, dass die Verteilungsfunktion $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ für ein Teilchen im Volumen (d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte, das Teilchen am Ort $\mathbf{r}$ mit Impuls $\mathbf{p}$ zu finden) durch folgende Formel gegeben ist

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = C \exp\left\{ -\frac{\mathbf{p}^2}{2mk_BT} - \frac{\Phi(\mathbf{r})}{k_BT} \right\} \tag{7}$$

wobei C ein Normierungsfaktor ist. *(1 Punkt)*

e) Wenden Sie Gl. (4) und Gl. (7) an um die barometrische Höhenformel im Schwerefeld der Erde herzuleiten. *(2 Punkte)*

Aufgabe 20 *Eindimensionales Ising Modell*

Wir betrachten nun das eindimensionale Ising Modell als einfachsten Ansatz zur Beschreibung von wechselwirkenden Spins. Hierbei befinden sich N Spin-1/2 Teilchen mit magnetischem Moment μ in einem homogenen Magnetfeld $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$. Die Spins seien nun entlang einer Kette angeordnet und wechselwirken nur kurzreichweitig miteinander. Als erste Näherung wird nur die Wechselwirkung benachbarter Teilchen berücksichtigt. Der Hamilton Operator (im CGS System) ist dann gegeben durch

$$\hat{H} = -\mu B \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_i - I \sum_{i=1}^{N-1} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_{i+1} \tag{8}$$

Die Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}_i = \hat{\sigma}_i^z$ besitzen Eigenwerte ± 1. Der Hamilton Operator wird in der Eigenbasis von $\hat{S}_z$ diagonal und die Eigenzustände von $\hat{H}$ werden durch N Erwartungswerte der Paulimatrizen $\sigma_1 = \pm 1$, $\sigma_2 = \pm 1$, $\ldots$, $\sigma_N = \pm 1$ festgelegt. Zusätzlich gehen wir von periodischen Randbedingungen aus, d.h. $\sigma_1 = \sigma_N$.

a) Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme Q_N. Führen Sie dazu die Matrix

$$P_{\sigma\sigma'} = \exp\left\{ \frac{1}{2}\beta\mu B(\sigma + \sigma') + \beta I \sigma\sigma' \right\}, \quad \sigma, \sigma' = \pm 1 \tag{9}$$

ein und weisen Sie nach, dass Q_N mithilfe der Spur von P^N ausgedrückt werden kann. *(1 Punkt)*

b) Bestimmen Sie die Eigenwerte λ_1 und λ_2 von P und zeigen Sie, dass die kanonische Zustandssumme gegeben ist durch

$$Q_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N, \tag{10}$$

mit

$$\lambda_{1,2} = e^y \left(\cosh x \pm \sqrt{e^{-4y} + \sinh^2 x} \right), \quad x := \frac{\mu B}{k_BT}, \quad y = \frac{I}{k_BT}. \tag{11}$$

(2 Punkte)

c) Zeigen Sie, dass sich das gesamte mittlere magnetische Moment $M = \mu\langle\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2 + \cdots + \hat{\sigma}_N\rangle$ durch

$$M = -\frac{\partial A}{\partial B}\bigg|_{T,N} \tag{12}$$

bestimmen lässt. Hierbei ist $A = -k_B T \ln Q_N$ die freie Energie. Berechnen Sie zusätzlich die Magnetisierung, d.h. das mittlere magnetische Moment pro Spin, im Grenzfall $N \to \infty$. Plotten oder skizzieren Sie diese Größe als Funktion von x für verschiedene Parameter y. Kann bei endlichen Temperaturen im thermodynamischen Limes spontane Magnetisierung auftreten? *(2 Punkte)*

d) Nun soll die Korrelation benachbarter Spins untersucht werden. Die Zahl der Paare mit antiparallel orientiertem Spin sei gegeben durch N_{+-}. Zeigen Sie, dass diese Zahl durch

$$\frac{N_{+-}}{N} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2N}\langle\sum_{i=1}^{N-1} \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_{i+1}\rangle \tag{13}$$

gegeben ist. *(1 Punkt)*

e) Berechnen Sie N_{+-}/N für $N \to \infty$ mit

$$\lim_{N\to\infty} \frac{N_{+-}}{N} = \frac{e^{-4y}}{\sqrt{e^{-4y} + \sinh^2 x}\,(\cosh x + \sqrt{e^{-4y} + \sinh^2 x})} \tag{14}$$

und untersuchen Sie diese Größe für $|y| \to \infty$. Betrachten Sie insbesondere den Fall ohne Magnetfeld ($x = 0$) und interpretieren Sie ihre Ergebnisse physikalisch. *(2 Punkte)*

f) Betrachten Sie in den Fällen $B \neq 0$, $I = 0$ und $B = 0$, $I \neq 0$ die Energie u pro Spin für große Teilchenzahlen. Wie verhält sich die spezifische Wärme $c_B = \frac{\partial u}{\partial T}\big|_B$ bei tiefen Temperaturen? *Hinweis:* Sie sollten folgende Ergebnisse erhalten:

$$B \neq 0, I = 0: \quad u = -\mu B \tanh x, \quad c_B = k_B \frac{x^2}{\cosh^2 x}, \tag{15}$$

$$B = 0, I \neq 0: \quad u = -I \tanh y, \quad c_B = k_B \frac{y^2}{\cosh^2 y}. \tag{16}$$

(2 Punkte)