Übungen in *Statistische Physik*

Übungsblatt 5

Bitte geben Sie Ihre Lösungen am **Dienstag, den 28.05.2019** in der Vorlesung ab.

1) 10 Punkte

Bearbeiten Sie die Punkte iv) bis vi) von Aufgabe 3) auf Übungsblatt 4.

2) 6 Punkte

Betrachten Sie zwei Systeme aus Spins mit $S = 1/2$, welche sich in einem äußeren Magnetfeld $\boldsymbol{B} = B\,\hat{\boldsymbol{e}}_z$ befinden. System 1 bestehe aus N_1 Spins, welche entlang der $+z$-Richtung ausgerichtet seien und System 2 bestehe aus N_2 Spins, welche entlang der $-z$-Richtung polarisiert sind, d. h. $\hat{S}_{iz}|\Psi_1\rangle = \frac{\hbar}{2}|\Psi_1\rangle$ und $\hat{S}_{jz}|\Psi_2\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\Psi_2\rangle$, wobei $|\Psi_1\rangle$ ($|\Psi_2\rangle$) den Zustand des Systems 1 (2) beschreibt und $i = 1, \ldots, N_1$ ($j = 1, \ldots, N_2$) die zugehörigen Spins nummeriert.

i) Bestimmen Sie für beide Spinsysteme die Energien E_1 bzw. E_2, sowie die Entropien S_1 bzw. S_2.

Nun werden beide Systeme miteinander in Kontakt gebracht, so dass sie untereinander Energie austauschen können, jedoch nicht mit der Umgebung.

ii) Geben Sie die Energie E_{1+2} sowie die Entropie S_{1+2} des Gesamtsystems (1+2) *unmittelbar* nach dem Zusammenfügen an, d. h. bevor jegliche Relaxation stattgefunden hat.

iii) Nach einer gewissen Zeit relaxiert das kombinierte System in den Gleichgewichtszustand. Nutzen Sie das "Maximum-Entropie Theorem" um die Entropie S_{1+2} des neuen Gleichgewichtszustandes zu bestimmen. Drücken Sie die Entropie S_{1+2} für $N_1 \gg 1$, $N_2 \gg 1$ durch die Spindichten n_σ aus:

$$n_\sigma = \frac{N_\sigma}{N} \quad \text{mit} \quad \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\} \quad \text{und} \quad N = N_\uparrow + N_\downarrow\,.$$

3) 10 Punkte

Betrachten Sie ein abgeschlossenes System, dass sich in N Teilsysteme aufteilen lässt, welche als statistisch unabhängig betrachtet werden können. Die Gesamtenergie E ist gegeben als Summe der Energien ε_i der Teilsysteme. Zeigen Sie ausgehend von den mikrokanonischen Zustandssummen $\Omega_i(\varepsilon_i)$ der Teilsysteme, dass sich die Entropie $S = k_B \ln(\Omega(E))$ des Systems durch

$$S(E) = \sum_{i=1}^{N} S_i(\varepsilon_i)$$

schreiben lässt. Zeigen Sie im Anschluss, dass im Gleichgewicht für alle Untersysteme i die Temperatur $T_i = T$ gleich ist. Mit T_i wird die absolute Temperatur eines Systems bezeichnet, die durch die folgende Gleichung definiert ist:

$$\frac{1}{T_i} := \left(\frac{\partial S_i}{\partial \varepsilon_i}\right)_{N_i,V_i} \quad \text{bzw.} \quad \frac{1}{T} := \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,V}.$$

Geben Sie eine kurze physikalische Begründung für Ihre Rechenschritte an.

4) 15 Punkte

Betrachten Sie ein System N unabhängiger Spins mit Spin $S = 1/2$ in einem äußeren Magnetfeld $\boldsymbol{B} = B\,\hat{\boldsymbol{e}}_z$. Der Hamiltonoperator des gesamten Systems sei gegeben durch

$$\hat{H} = 2\mu_B B \sum_{i=1}^{N} \hat{S}_{iz}\,,$$

wobei mit $\hat{S}_{iz}$ die z-Komponente des Spinoperators $\hat{\boldsymbol{S}}_i$, $i = 1, \ldots, N$ bezeichnet wird.

i) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme Z_c und die freie Energie $F = -k_{\mathrm{B}}T\ln(Z_c)$ des Systems.

ii) Ermitteln Sie die mittlere Magnetisierung des gesamten Systems $M = -2\mu_B\langle\hat{S}_z\rangle$ mit $\hat{S}_z = \sum_{i=1}^{N}\hat{S}_{iz}$, indem Sie die passende Ableitung von F berechnen.

iii) Bestimmen Sie die Entropie S, die magnetische Suszeptibilität $\chi = \partial M/\partial B$ sowie die spezifische Wärme $C = \partial E/\partial T$.

iv) Bestimmen Sie das asymptotische Verhalten von χ und C für die Fälle $x \gg 1$ und $x \ll 1$ mit $x = \mu_B B/k_{\mathrm{B}}T$. Geben Sie eine kurze physikalische Interpretation Ihrer Resultate als Funktion von B und T an.

v) Skizzieren Sie M, χ und C als Funktion von B für feste Werte von T, sowie als Funktion von T für feste Werte von B.

5) 10 Punkte

Betrachten Sie ein physikalisches System mit fester Teilchenzahl N sowie festem Volumen V und mit zugehörigem Hamiltonoperator $\hat{H}$. Im Folgenden wollen wir die Entropie $S[\hat{\rho}] = -k_{\mathrm{B}}\langle\ln\hat{\rho}\rangle$ dieses Systems für eine fest vorgegebene mittlere Energie $E = \langle\hat{H}\rangle$ maximieren und uns davon überzeugen, dass der zugehörige Zustand, welcher durch den maximierenden Dichteoperator $\hat{\rho}_c$ beschrieben wird zeitunabhängig ist, also den Gleichgewichtszustand beschreibt.

i) Nennen Sie zunächst alle Nebenbedingungen, welche die oben genannten Dichtematrizen $\hat{\rho}$ erfüllen müssen und geben Sie anschließend das zugehörige Lagrange-Funktional $\mathcal{L}[\hat{\rho}]$ zur Maximierung der Entropie $S[\hat{\rho}]$ unter den genannten Bedingungen an.

ii) Zeigen Sie, dass der maximierende Dichteoperator durch

$$\hat{\rho}_c = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}}{Z_c} \quad \text{mit} \quad Z_c = \mathrm{Tr}\{\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\} \tag{1}$$

gegeben ist, wobei β ein (passend gewählter) Lagrange-Multiplikator ist.

Hinweis: Die Extremalbedingung lautet: $\delta\mathcal{L} = \mathcal{L}[\hat{\rho} + \delta\hat{\rho}] - \mathcal{L}[\hat{\rho}] = 0$ für alle $\delta\hat{\rho}$. Außerdem gilt, dass $\mathrm{Tr}\{\delta\hat{\rho}\,\hat{A}\} = 0$ für alle $\delta\hat{\rho}$ nur erfüllt sein kann, wenn $\hat{A} = 0$ gilt. Können Sie dies begründen?

iii) Erklären Sie, warum der durch $\hat{\rho}_c$ aus Gl. (1) beschriebene gemischte Zustand im Gleichgewicht ist, d. h., warum $\hat{\rho}_c$ zeitunabhängig ist ($\partial\hat{\rho}_c/\partial t = 0$) wenn die Dynamik des Systems allein durch den Hamiltonoperator $\hat{H}$ gegeben ist. Können Sie andere Dichteoperatoren $\hat{\rho}$ finden, welche zeitunabhängig sind und $\langle\hat{H}\rangle = E$ erfüllen? Welche Eigenschaft unterscheidet diese Dichteoperatoren $\hat{\rho}$ dann von $\hat{\rho}_c$ aus Gl. (1), d. h. was zeichnet $\hat{\rho}_c$ als den Dichteoperator des thermodynamischen Gleichgewichts aus?