Prof. Dr. A. Schadschneider
C. Eilhardt, S. Nowak
Wintersemester 2011/12

Theoretische Physik in 2 Semestern II
12. Übung

www.thp.uni-koeln.de/∼as/thp2sem1112.html

Abgabe: *Dienstag, 24. Januar*

43. Idealer Paramagnet II

5+6+6 Punkte

In dieser Aufgabe soll der ideale Paramagnet aus Aufgabe 42 im kanonischen Formalismus behandelt werden.

a) Zeigen Sie, dass die Zustandssumme des N-Spin Systems durch $Z(N) = Z(1)^N$ gegeben ist, wobei

$$Z(1) = e^{\beta E_0} + e^{-\beta E_0} = 2\cosh(\beta E_0)$$

die Zustandssumme des 1-Spin Systems ist.
Hinweis: Ersetzen Sie die Summe über die 2^N Mikrozustände des Gesamtsystems durch N Summen über die zwei Einstellmöglichkeiten der einzelnen Spins.

b) Berechnen Sie aus der Zustandssumme die Energie E und Wärmekapazität C_V als Funktion der Temperatur T. Skizzieren Sie $E(T)$ und interpretieren Sie den Verlauf. Was bedeuten negative Temperaturen?

c) Berechnen Sie den Energieverlauf $E(T)$ nun, indem Sie den Ausdruck

$$S(E,N) = -\frac{Nk_\mathrm{B}}{2}\left[\left(1+\frac{E}{NE_0}\right)\ln\left(1+\frac{E}{NE_0}\right) + \left(1-\frac{E}{NE_0}\right)\ln\left(1-\frac{E}{NE_0}\right) - \ln 4\right]$$

für die Entropie aus Aufgabe 42 verwenden. Vergleichen Sie das Ergebnis mit Teil b).
Hinweis: Über $\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N = \frac{1}{T}$ erhalten Sie $T(E)$, was Sie invertieren können.

44. Ising Modell

4+6+4 Punkte

Das Ising-Modell ist ein einfaches Modell zur Beschreibung von Ferromagnetismus in Festkörpern. Gegeben sind, ähnlich wie beim idealen Paramagneten, N Spins, die diesmal jedoch miteinander wechselwirken. Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass es kein externes Magnetfeld gibt und dass die Spins nur zwei Einstellmöglichkeiten $\sigma_i = \pm 1$ haben, nur mit den nächsten Nachbarn wechselwirken und auf einer 1-dimensionalen, periodischen Kette angeordnet sind (d.h. $\sigma_{i+N} = \sigma_i$). Die Energie $E(\underline{\sigma})$ des Systems ist durch

$$E(\underline{\sigma}) = -J\sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1}$$

gegeben.

a) Betrachten Sie zunächst den Fall $N = 2$, d.h. mit 4 möglichen Konfigurationen (↑↑, ↑↓, ↓↑ und ↓↓). Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit, mit der die Konfiguration angenommen werden für $J = 0.2k_BT$, $J = 2k_BT$ und $J = -2k_BT$.

b) Zeigen Sie, dass für beliebiges N die Zustandssumme

$$Z = \sum_{\underline{\sigma} \in \{-1,1\}^N} e^{-\beta E(\underline{\sigma})}$$

des Systems durch

$$Z = 2^N \cosh^N(\beta J)$$

gegeben ist.

c) Welche Konfigurationen erwarten Sie für $J > 0$ bzw. $J < 0$ im Grenzfall hoher und niedriger Temperaturen? Welchen Wert nimmt dabei die Magnetisierung

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$$

an? (Qualitative Beschreibung, keine Rechnung nötig!)

45. Shannon Entropie

3+4+6+3+3 Punkte

Allgemein wird die Entropie eines Systems mit Ω Mikrozuständen, die jeweils mit Wahrscheinlichkeit p_n $(n = 1, \ldots, \Omega)$ besetzt werden, durch

$$S = -k_B \sum_{n=1}^{\Omega} p_n \ln p_n \tag{1}$$

definiert. Die den Mikrozuständen entsprechenden Energien seien mit $E_1, \ldots, E_\Omega$ bezeichnet.

a) Zeigen Sie, dass Gleichung (1) im Falle der mikrokanonischem Gesamtheit $(p_n = 1/\Omega)$ auf $S = k_B \ln \Omega$ führt.

b) Zeigen Sie für die kanonische Gesamtheit $(p_n = e^{-\beta E_n}/Z)$, dass $S = (E - F)/T$, wobei $E = \langle E_n \rangle$ der Energiemittelwert und $F = -\ln(Z)/\beta$ die freie Energie ist.

c) Zeigen Sie für zwei beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilungen p_n und π_n $(n = 1, \ldots, \Omega)$, dass die Ungleichung

$$S = -k_B \sum_{n=1}^{\Omega} p_n \ln p_n \leq -k_B \sum_{n=1}^{\Omega} p_n \ln \pi_n \tag{2}$$

gilt.
Hinweis: Für alle $x > 0$ gilt $\ln x \leq x - 1$.

d) Zeigen Sie unter verwendung von Gleichung (2), dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung der mikrokanonischen Gesamtheit unter allen Verteilungen die größte Entropie besitzt.

e) Zeigen Sie analog zu d), dass die kanonische Verteilung unter allen Verteilungen *mit gleichem Energiemittelwert* die größte Entropie besitzt.