Institut für Theoretische Physik
der Universität zu Köln

R. Klesse
M. Moos

Statistische Mechanik
Blatt 11

Wintersemester 2010/11

Abgabe: *Freitag, 14. Januar, bis 10 Uhr im grauen Kasten vor der Theorie.*

Internetseite: *www.thp.uni-koeln.de/~rk/statmech_ws10*

44. Schottky-Peak *5+5 Punkte*

Ein System aus N Einzelspins sitzt in einem homogenen Magnetfeld. Jeder von ihnen hat die Energie $+\epsilon$, wenn er gegen das Magnetfeld ausgerichtet ist, und $-\epsilon$, wenn er parallel zum Feld gerichtet ist.

a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme, Energie und Wärmekapazität des Systems als Funktion der Temperatur.

b) Aufgrund des begrenzten Energiespektrums besitzt die Wärmekapazität ein Maximum bei einer Temperatur T_0. Zeigen Sie, dass T_0 durch $\tanh\left(\frac{\epsilon}{k_B T_0}\right) = \frac{k_B T_0}{\epsilon}$ bestimmt ist.

45. Großkanonische Zustandssumme *2+1+3 Punkte*

Die kanonische Zustandssumme des einatomigen idealen Gases ist

$$Z(T,V,N) = \frac{1}{N!}\left(\frac{V}{\lambda_T^3}\right)^N \quad \text{mit} \quad \lambda_T \equiv \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \,.$$

Berechnen Sie daraus nacheinander

a) ... die großkanonische Zustandssumme

b) ... das großkanonische Potential

c) ... mittlere Teilchenzahl, Energie und Druck des Gases als Funktion von Temperatur und chemischen Potenzial; verifizieren Sie $\Phi = -pV$.

46. Großkanonisches Ensemble *9 Punkte*

In der Vorlesung wurde die Verteilung des kanonischen Ensembles als die Verteilung hergeleitet, die die Shannon-Entropie unter der Nebenbedingung eines vorgegebenen Erwartungswertes für die Energie maximiert. Leiten Sie nun ebenso die großkanonische Verteilung her, indem sie als Nebenbedingungen vorgegebene Erwartungswerte für Energie und Teilchenzahl annehmen.

47. Methode der Transfermatrix *5+1+3+3+4 Punkte*

Im kanonischen Ensemble ist es recht einfach möglich, eindimensionale Systeme mit kurzreichweitiger Wechselwirkung exakt zu behandeln. Hier wollen wir uns an einem einfachen Paramagneten versuchen.

$N+1$ Spins mit je zwei Konfigurationen $s_i \in \{-1,+1\}$, $i \in \{0,...N\}$, seien in einer Reihe angeordnet. Die Energie einer gegebenen Konfiguration sei

$$\begin{aligned} H(s_0,\ldots,s_N) &= J\sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} \;+\; \nu B \sum_{i=1}^{N-1} s_i \;+\; \frac{\nu B}{2}(s_0+s_N) \\ &\equiv \sum_{i=0}^{N-1}\left(\frac{\nu B}{2}(s_i+s_{i+1}) \;+\; J s_i s_{i+1}\right) . \end{aligned}$$

Die Konstante ν bestimmt die Stärke der Spin-Magnetfeld Wechselwirkung. s_0 und s_N wechselwirken absichtlich nur halb so stark mit dem Magnetfeld B wie die inneren Spins, damit die Rechnung einfacher wird; für $N \gg 1$ ist dies natürlich unerheblich. Der Spin-Spin Wechselwirkungsparameter J sei negativ und als Randbedingungen wollen wir zunächst s_0 und s_N festhalten.

a) Zeigen Sie direkt oder über vollständige Induktion über N, dass die vier kanonischen Zustandssummen (es gibt vier mögliche Einstellungen der Randspins)

$$Z_{s_0,s_N} \equiv \sum_{s_1,\cdots,s_{N-1}} \exp\left(-\beta H(s_0,\ldots,s_N)\right)$$

jeweils Elemente der Matrix $\mathcal{T}^N$ mit $\mathcal{T} = \begin{pmatrix} a/b & b \\ b & 1/(ab) \end{pmatrix}$ sind, wobei

$$a = e^{\beta\nu B} \quad \text{und} \quad b = e^{\beta J} .$$

b) Nun wollen wir zu zyklischen Randbedingungen übergehen; es seien nun nicht mehr beide Randspins vorgegeben, sondern wir wollen lediglich $s_0 = s_N$ fordern. Zeigen Sie für diesen Fall:

$$Z \equiv \sum_{s_0,\cdots,s_{N-1},s_N=s_0} \exp\left(-\beta H(s_0,\ldots,s_N)\right) = \mathrm{Tr}(\mathcal{T}^N)$$

c) Diagonalisieren Sie $\mathcal{T}$ und berechnen Sie damit Z exakt.

d) Im Limes großer N kann man den Beitrag des kleineren Eigenwerts von $\mathcal{T}$ vernachlässigen. Nähern Sie Z und die freie Energie F damit bis zur zweiten Ordnung in B.

e) Berechnen Sie daraus die magnetische Suszeptibilität $\chi_B = -\frac{1}{N}\frac{\partial^2 F}{\partial B^2}$ bei $B = 0$ und Skizzieren Sie deren Verlauf in Abhängigkeit der Temperatur.