

Allgemeiner Hinweis: Die Relation $\partial_T = -\beta^2 \partial_\beta$ erweist sich oftmals als nützlich.

1 Energie und Entropie im kanonischen Ensemble (10 + 3 P) Sei $Z(T)$ die Zustandssumme des *kanonischen* Ensembles. Die *freie Energie* ist definiert als $F(T) = -T \ln Z(T)$. Diese Definition führt auf kompakte Beziehungen zwischen dieser neuen Größe und dem Erwartungswert der Energie und der Entropie.

a) (5 P) Zeigen Sie, dass $\langle E \rangle = -\partial_\beta \ln Z = F - T \partial_T F(T)$.

Wir stellen somit den Zusammenhang zur Thermodynamik her, indem wir F mit der bekannten Helmholtz' freien Energie identifizieren. Aus der bekannten Beziehung $F = E - TS$ folgt dann, dass die Entropie durch $S = -\partial_T F(T)$ gegeben ist.

b) (5 P) Zeigen Sie, dass gilt $S = -\langle \ln p \rangle \equiv -\sum_r p_r \ln p_r$, wobei p die kanonische Verteilung sei. Vergleichen Sie diesen Ausdruck mit der Boltzmann-Entropie im mikrokanonischen Ensemble.

c) (Bonus: 3 P) Es ist allerdings nicht a priori klar, dass diese Entropie auch tatsächlich mit der Boltzmann-Entropie (also der Entropie des mikrokanonischen Ensembles) übereinstimmt. Falls dem nicht so ist, wäre die Thermodynamik abhängig vom verwendeten Ensemble und die Theorie damit reichlich nutzlos.

Zeigen Sie, dass die Entropie $S(T) = -\partial_T T \ln Z$ im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$) mit der mikrokanonischen/Boltzmann Entropie $S_B(E(T))$ übereinstimmt.

Gehen Sie dazu von der kanonischen Zustandssumme in der "Energiedarstellung"

$$Z_k = \int \frac{dE}{\Delta E} e^{-\beta E + S_B(E)}$$

aus und führen eine Sattelpunktsnäherung durch.

2 Klassische harmonische Oszillatoren im kanonischen Ensemble (12 P)

Wir betrachten ein System aus N identischen, klassischen und unabhängigen Oszillatoren (in 1D), beschrieben durch die Hamilton-Funktion

$$H(\{q_i, p_i\}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + m\omega^2 \frac{q_i^2}{2} \right],$$

wobei m und ω die Masse und Eigenfrequenz, und q_i und p_i die Auslenkungen und Impulse der Oszillatoren bezeichnen. Stellen Sie sich vor die Oszillatoren wären auf Gitterplätzen angebracht und oszillieren um diese Gleichgewichtslagen. Das System sei im Gleichgewicht mit einem Wärmereservoir der Temperatur T und gehorche daher der Boltzmann-Verteilung. Beachten Sie, dass die Oszillatoren unterscheidbar sind, da sie sich an unterschiedlichen Positionen befinden.

- a) (6 P) Berechnen Sie die Zustandssumme des Systems bei der Temperatur T ,

$$Z(T) = \int \prod_i \frac{dq_i dp_i}{2\pi\hbar} e^{-\beta H(\{q_i, p_i\})}.$$

Das Integral verläuft hier über den gesamten Phasenraum.

- b) (6 P) Berechnen und skizzieren Sie die mittlere Energie $E \equiv \langle H \rangle$ und Entropie $\langle S \rangle = -\frac{\partial}{\partial T} F(T)$ des Systems als Funktion von T bei festem ω . Berechnen Sie außerdem die Wärmekapazität bei konstantem ω nach $C_\omega = (\partial \langle E \rangle / \partial T)_\omega$.

3 Kanonisches Ensemble des Ising Paramagneten (18 P) Wir betrachten ein System bestehend aus N Spins $s_i = \pm 1$ in einem magnetischen Feld h , dass durch die Hamilton-Funktion

$$H(\{s_i\}) = - \sum_{i=1}^N h s_i$$

beschrieben wird. Das System befinde sich im Gleichgewicht mit einem Wärmereservoir der Temperatur T , so dass die Spin-Konfigurationen $\{s_i\}$ der Boltzmann-Verteilung gehorchen:

$$p(\{s_i\}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\{s_i\})}.$$

Dabei wird die Normierungskonstante

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H(\{s_i\})}$$

als kanonische Zustandssumme bezeichnet. Die Summation verläuft hier über alle 2^N Konfigurationen $\{s_i\}$, die das System annehmen kann.

- a) (8 P) Berechnen Sie die Zustandssumme Z als Funktion von h und T (bzw. β).
- b) (4 P) Die mittlere Energie des Systems ist definiert als $E = \langle H \rangle = \sum_{\{s_i\}} p(\{s_i\}) H(\{s_i\})$. Berechnen Sie die Energie für den Ising Paramagneten.
- c) (6 P) Die mittlere Magnetisierung des Systems ist definiert als $M = \langle \mathcal{M} \rangle$ mit $\mathcal{M} = \sum_{i=1}^N s_i$. Zeigen Sie, dass $M = T \partial_h \ln Z(h, T)$ für den Ising Paramagneten gilt und berechnen Sie anschließend explizit die Magnetisierung.