

Zentralübung

Thermodynamik und Statistische Physik (T4)

Lösungsskizze Blatt 9

WiSe 2019/20

Aufgabe 1: Ising Modell, kanonisches Ensemble

a) Wir benutzen Induktion. Wir haben für zwei Teilchen,

$$Z_2 = \sum_{s_1, s_2} e^{\beta J s_1 s_2} = \sum_{s_1} (e^{\beta J s_1} + e^{-\beta J s_1}) = 2(e^{\beta J} + e^{-\beta J}) = 2 \cdot 2 \cosh(\beta J).$$

Für den Induktionsschritt

$$\begin{aligned} Z_{N+1} &= \sum_{s_1, \dots, s_{N+1}} e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_N s_{N+1})} \\ &= \sum_{s_1, \dots, s_{N+1}} e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} e^{\beta J s_N s_{N+1}} \\ \text{Zeile *} &= \sum_{s_1, \dots, s_{N-1}, s_{N+1}} \left[e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} e^{\beta J s_N s_{N+1}} \Big|_{s_N=+1} + e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} e^{\beta J s_N s_{N+1}} \Big|_{s_N=-1} \right] \\ \text{+-Terme} &= \sum_{s_1, \dots, s_{N-1}, s_{N+1}} \left[\left(e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} \Big|_{s_N=+1} + \overbrace{e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} \Big|_{s_N=-1}}^{N1} \right) e^{\beta J s_N s_{N+1}} \right. \\ &\quad \left. + \left(e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} \Big|_{s_N=-1} + \overbrace{e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} \Big|_{s_N=+1}}^{N2} \right) e^{-\beta J s_N s_{N+1}} \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} \Big|_{s_N=-1}}_{-N1} e^{\beta J s_N s_{N+1}} - \underbrace{e^{\beta J (s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} \Big|_{s_N=+1}}_{-N2} e^{-\beta J s_N s_{N+1}} \right]. \end{aligned}$$

Die erste zwei Zeilen der letzten Gleichung sind laut Induktionsannahme $\sum_{s_{N+1}} Z_N (e^{\beta J s_{N+1}} + e^{-\beta J s_{N+1}})$, während die letzte Zeile (Summe über $-N1 - N2$) ist nach eine Transformation der Summationsvariabel $s_{N+1} \mapsto -s_{N+1}$ genau die "Zeile *", also gleich Z_{N+1} . Insgesamt haben wir

$$Z_{N+1} = \sum_{s_{N+1}} \frac{Z_N}{2} (e^{\beta J s_{N+1}} + e^{-\beta J s_{N+1}}) = Z_N \cosh(\beta J) = 2(2 \cosh(\beta J))^N.$$

b) Wir fixieren hilfreiche Notation. Sei $I_n = \{1, \dots, n\}$ und $I_{(n, \sigma)} := I_n \setminus \sigma$, $\sigma \subset I_n$ eine Untermenge. Z.B. $I_{(n, \{2\})} = \{1, 3, 4, \dots, n\}$ usw. Dann schreiben wir Summationen explizit hin, und wir beginnen in der j -te Position:

$$\begin{aligned} Z_N \langle s_j \rangle &= \sum_{s_i, i \in I_N} s_j \exp \left[\beta J \sum_{k \in I_{N-1}} s_k s_{k+1} \right] \\ &= \sum_{s_i, i \in I_{(N, \{j\})}} (e^{\beta J s_{j+1}} - e^{-\beta J s_{j+1}}) \cdot \exp \left[\sum_{k \in I_{(N-1, \{j\})}} s_k s_{k+1} \right] \\ &\quad + \sum_{s_i, i \in I_{(N, \{j\})}} (e^{\beta J s_{j-1}} - e^{-\beta J s_{j-1}}) \cdot \exp \left[\sum_{k \in I_{(N-1, \{j-1\})}} s_k s_{k+1} \right] \\ &= \sum_{s_i, i \in I_{(N, \{j, j+1\})}} (e^{\beta J} - e^{-\beta J}) (e^{\beta J s_{j+2}} - e^{-\beta J s_{j+2}}) \cdot \exp \left[\sum_{k \in I_{(N-1, \{j, j+1\})}} s_k s_{k+1} \right] \\ &\quad + \sum_{s_i, i \in I_{(N, \{j-1, j\})}} (e^{\beta J} - e^{-\beta J}) (e^{\beta J s_{j-2}} - e^{-\beta J s_{j-2}}) \cdot \exp \left[\sum_{k \in I_{(N-1, \{j-2, j-1\})}} s_k s_{k+1} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{s_i, i \in I_{(N, \{j, j+1, j+2\})}} (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^2 (e^{\beta J s_{j+3}} - e^{-\beta J s_{j+3}}) \cdot \exp \left[\sum_{k \in I_{(N-1, \{j, j+1, j+2\})}} s_k s_{k+1} \right] \\
&+ \sum_{s_i, i \in I_{(N, \{j-2, j-1, j\})}} (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^2 (e^{\beta J s_{j-3}} - e^{-\beta J s_{j-3}}) \cdot \exp \left[\sum_{k \in I_{(N-1, \{j-3, j-2, j-1\})}} s_k s_{k+1} \right].
\end{aligned}$$

Wir bemerken, jede explizite Summation gibt einfach ein Faktor $(e^{\beta J} - e^{-\beta J})$ und versetzt die Indizes im mittleren Faktor $(e^{\beta J s_\ell} - e^{-\beta J s_\ell})$: im ersten Term ‘steigt’ der Index (Richtung rechts auf die Kette), während im zweiten sinkt der Index (Richtung links auf die Kette). Nach $N - j - 1$ Schritte für den ersten Term und $j - 2$ Schritte für den zweiten Term haben wir

$$\begin{aligned}
Z_N \langle s_j \rangle &= \sum_{s_i, i \in I_{(N, \{j, \dots, N-1\})}} (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{N-j-1} (e^{\beta J s_N} - e^{-\beta J s_N}) \cdot \exp \left[\sum_{k \in I_{(N-1, \{j, \dots, N-1\})}} s_k s_{k+1} \right] \\
&+ \sum_{s_i, i \in I_{(N, \{2, \dots, j\})}} (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{j-2} (e^{\beta J s_1} - e^{-\beta J s_1}) \cdot \exp \left[\sum_{k \in I_{(N-1, \{1, \dots, j-1\})}} s_k s_{k+1} \right]
\end{aligned}$$

Da

$$\begin{aligned}
I_{(N, \{j, \dots, N-1\})} &= \{1, \dots, j-1, N\}, & I_{(N-1, \{j, \dots, N-1\})} &= \{1, \dots, j-1\} \\
I_{(N, \{2, \dots, j\})} &= \{1, j+1, \dots, N\}, & I_{(N-1, \{1, \dots, j-1\})} &= \{j, \dots, N-1\}
\end{aligned}$$

gilt, ist die Summation über s_N im ersten Term, sowie die Summation über s_1 im zweiten Term unabhängig von den Rest der Summationen. Wegen der Symmetrie bei $s_1 \mapsto -s_1$ und $s_N \mapsto -s_N$ gilt dann

$$Z_N \langle s_j \rangle = \sum_{\dots} \dots \sum_{s_N} (e^{\beta J s_N} - e^{-\beta J s_N}) + \sum_{\dots} \dots \sum_{s_1} (e^{\beta J s_1} - e^{-\beta J s_1}) = 0$$

c) Wir schreiben wieder Summationen explizit hin, und beginnen von links (s_1);

$$\begin{aligned}
Z_N \langle s_i s_j \rangle &= \sum_{s_k, k \in I_N} s_i s_j \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{N-1}} s_\ell s_{\ell+1} \right] \\
&= \sum_{s_k, k \in I_{(N, \{1\})}} s_i s_j (e^{\beta J s_2} + e^{-\beta J s_2}) \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{(N-1, \{1\})}} s_\ell s_{\ell+1} \right] \\
&= (e^{\beta J} + e^{-\beta J}) \sum_{s_k, k \in I_{(N, \{1, 2\})}} s_i s_j (e^{\beta J s_3} + e^{-\beta J s_3}) \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{(N-1, \{1, 2\})}} s_\ell s_{\ell+1} \right]
\end{aligned}$$

also werden bei jedem Schritt zwischen Positionen 1 und i Faktoren $(e^{\beta J} + e^{-\beta J}) = 2 \cosh(\beta J)$ erzeugt. Nach $i - 1$ Schritte haben wir:

$$\begin{aligned}
Z_N \langle s_i s_j \rangle &= (2 \cosh(\beta J))^{i-2} \sum_{s_k, k \in I_{(N, \{1, \dots, i-1\})}} s_i s_j (e^{\beta J s_i} + e^{-\beta J s_i}) \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{(N-1, \{1, \dots, i-1\})}} s_\ell s_{\ell+1} \right] \\
&= (2 \cosh(\beta J))^{i-1} \sum_{s_k, k \in I_{(N, \{1, \dots, i\})}} s_j (e^{\beta J s_{i+1}} - e^{-\beta J s_{i+1}}) \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{(N-1, \{1, \dots, i\})}} s_\ell s_{\ell+1} \right] \\
&= (2 \cosh(\beta J))^{i-1} (2 \sinh(\beta J)) \sum_{s_k, k \in I_{(N, \{1, \dots, i+1\})}} s_j (e^{\beta J s_{i+2}} - e^{-\beta J s_{i+2}}) \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{(N-1, \{1, \dots, i+1\})}} s_\ell s_{\ell+1} \right].
\end{aligned}$$

Für jede explizite Summation zwischen i und j wird also ein Faktor $2 \sinh(\beta J)$ erzeugt. $j - i - 1$ Schritte weiter (also bis Position $j - 1$) haben wir

$$\begin{aligned}
Z_N \langle s_i s_j \rangle &= (2 \cosh(\beta J))^{i-1} (2 \sinh(\beta J))^{j-i-1} \sum_{s_k, k \in I_{(N, \{1, \dots, j-1\})}} s_j (e^{\beta J s_j} - e^{-\beta J s_j}) \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{(N-1, \{1, \dots, j-1\})}} s_\ell s_{\ell+1} \right] \\
&= (2 \cosh(\beta J))^{i-1} (2 \sinh(\beta J))^{j-i} \sum_{s_k, k \in I_{(N, \{1, \dots, j\})}} (e^{\beta J s_{j+1}} + e^{-\beta J s_{j+1}}) \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{(N-1, \{1, \dots, j\})}} s_\ell s_{\ell+1} \right] \\
&= (2 \cosh(\beta J))^i (2 \sinh(\beta J))^{j-i} \sum_{s_k, k \in I_{(N, \{1, \dots, j+1\})}} (e^{\beta J s_{j+2}} + e^{-\beta J s_{j+2}}) \cdot \exp \left[\sum_{\ell \in I_{(N-1, \{1, \dots, j+1\})}} s_\ell s_{\ell+1} \right]
\end{aligned}$$

also zwischen Positionen j und N werden für jede explizite Summation Faktoren von $\cosh(\beta J)$ erzeugt. Schreiben wir noch alle Summationen bis s_N explizit hin, bleibt dann noch:

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z_N} (2 \cosh(\beta J))^{N+i-j-1} (2 \sinh(\beta J))^{j-i} = \tanh(\beta J)^{j-i}$$

Aufgabe 2: Dipole

a) Wir haben $H_1 = \hat{L} = (\sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{x}^{\alpha} - L)|_{p_{\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^{\alpha}}}$, wo $\alpha = 1, 2, 3, \phi, \theta$. Wir haben

$$p_i = m(\dot{r})_i, \quad p_{\theta} = I\dot{\theta}, \quad p_{\phi} = I \sin^2 \theta \dot{\phi}$$

also ist

$$H_1 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{p_{\theta}^2}{2I} + \frac{p_{\phi}^2}{2I \sin^2 \theta} - \mu \mathcal{E} \cos \theta.$$

und $H = \sum_{i=1}^N H_1$.

b) Da es keine Wechselwirkung gibt, gilt wie im Blatt 8, dass

$$Z_N = \frac{Z_1^N}{N!}.$$

Wir rechnen:

$$\begin{aligned} Z_1 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\mathbb{R}^3} d^3p \int_{\mathbb{R}} p_{\theta} \int_{\mathbb{R}} p_{\phi} e^{-\beta \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{p_{\theta}^2}{2I} + \frac{p_{\phi}^2}{2I \sin^2 \theta} - \mu \mathcal{E} \cos \theta \right)} \\ &= 2\pi V \int_0^{\pi} d\theta e^{\beta \mu \mathcal{E} \cos \theta} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} d^3p e^{-\beta \frac{\vec{p}^2}{2m}}}_{\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} p_{\theta} e^{-\beta \frac{p_{\theta}^2}{2I}}}_{\sqrt{\frac{2\pi I}{\beta}}} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} p_{\phi} e^{-\beta \frac{p_{\phi}^2}{2I \sin^2 \theta}}}_{\sqrt{\frac{2\pi I \sin^2 \theta}{\beta}}} \\ &= (2\pi)^{7/2} IV \frac{m^{3/2}}{\beta^{5/2}} \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta e^{\beta \mu \mathcal{E} \cos \theta} \\ &= (2\pi)^{7/2} IV \frac{m^{3/2}}{\beta^{5/2}} \frac{1}{\beta \mu \mathcal{E}} \int_{-\beta \mu \mathcal{E}}^{\beta \mu \mathcal{E}} dy e^y \\ &= 2m^{3/2} (2\pi kT)^{7/2} \frac{VI}{\mu \mathcal{E}} \sinh(\beta \mu \mathcal{E}) \end{aligned}$$

also haben wir, dass

$$Z_N = \frac{1}{N!} \left(\frac{2m^{3/2}}{(2\pi \hbar)^5} (2\pi kT)^{7/2} \frac{VI}{\mu \mathcal{E}} \sinh(\beta \mu \mathcal{E}) \right)^N.$$

c) Wir haben

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = - \left(\frac{\partial}{\partial V} \right)_{T,N} (-kT \log Z_N) = \frac{NkT}{V}.$$

und

$$\begin{aligned} U &= -\partial_{\beta} \log Z_N \\ &= -\partial_{\beta} (N \log Z_1) \\ &= -N \partial_{\beta} \left[-\frac{7}{2} \log \beta + \log (\sinh(\beta \mu \mathcal{E})) \right] \\ &= \frac{7}{2} NkT - N \mu \mathcal{E} \coth(\beta \mu \mathcal{E}). \end{aligned}$$

d) Wir bemerken, dass

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P} &= \sum_{i=1}^N \langle \mu \cos \theta_i \rangle \\
 &= \frac{1}{Z_N} \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{5N}} \int d\Gamma \exp(-\beta H) \sum_{i=1}^N (\mu \cos \theta_i) \\
 &= \frac{1}{Z_N} \frac{1}{N!(2\pi\hbar)^{5N}} \int d\Gamma \beta^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} \right)_{T,V} \exp(-\beta H) \\
 &= kT \left(\frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} \right)_{T,V} \log Z_N.
 \end{aligned}$$

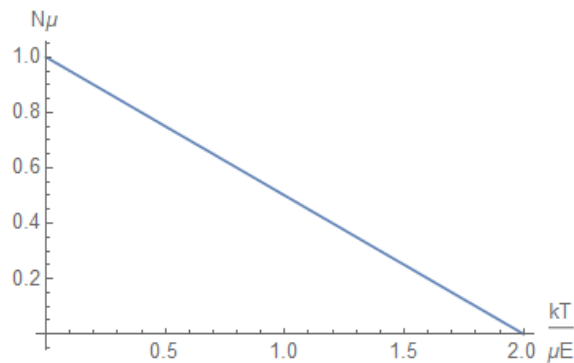
also ist

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P} &= NkT \left(\frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} \right)_{T,V} (-\log \mathcal{E} + \log \sinh(\beta\mu\mathcal{E})) \\
 &= -\frac{NkT}{\mathcal{E}} + N\mu \coth\left(\frac{\mu\mathcal{E}}{kT}\right)
 \end{aligned}$$

Für den Grenzfäll $\mathcal{E} \gg 1$ haben wir $\coth(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} \rightarrow \frac{e^x}{e^x} = 1$ für $x \gg 1$. Also gilt

$$\mathcal{P} \simeq -\frac{NkT}{\mathcal{E}} + N\mu = N\mu \left(1 - \frac{kT}{\mu\mathcal{E}}\right)$$

und die Skizze



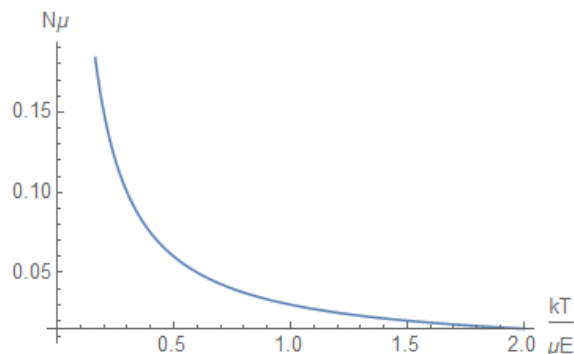
Für den Grenzfäll $\mathcal{E} \ll 1$ berechnen wir die Laurent-Reihe von \mathcal{P} zur führende Ordnung:

$$\coth(x) = \frac{1+1/2x^2+\dots}{x+1/6x^3+\dots} = \frac{1}{x} \frac{1+1/2x^2+\dots}{1+1/6x^2+\dots} = \frac{1}{x} (1+1/2x^2+\dots)(1-1/6x^2+\dots) = \frac{1}{x} + \frac{1}{3}x + \mathcal{O}(x^3),$$

also haben wir

$$\mathcal{P} \simeq N\mu \left(\frac{kT}{\mu\mathcal{E}} + \frac{\mu\mathcal{E}}{3kT} - \frac{kT}{\mu\mathcal{E}} \right) = \frac{N\mu^2\mathcal{E}}{kT}$$

und die Skizze



Aufgabe 3: Äquipartitionstheorem

- a) Aussage: für ein System mit allgemeine Koordinaten q_i und zugehörige Momente p_i und Hamilton-Funktion $H(q_i, p_i)$, gilt

$$\left\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = \delta_{ij} kT, \quad x_i = q_i \text{ oder } p_i.$$

Eine nötige Annahme im Fall des kanonischen Ensembles ist dass der Randbeitrag im Phasenraum Γ Null ist: $x_i e^{-\beta H(x_i)} \Big|_{\partial\Gamma} = 0$.

- b) Wir müssen in alle Beispiele die Energie $\langle H \rangle$ in der Form des Theorems bringen. Da Erwartungswerte linear sind, gilt $\langle H \rangle = \langle N \cdot H_1 \rangle = N \langle H_1 \rangle$ in jedem der Beispiele (i)–(iii), also betrachten wir jeweils nur die 1-Teilchen Systeme (und mit p_i ist jetzt die i -te Komponente von \vec{p} gemeint).

- (i) Da $x \frac{\partial}{\partial x} x^n = n x^n$, haben wir dass

$$H_1 = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} + \frac{\phi^2}{2I} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[p_i \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{p_i^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} \right) \right] + \frac{1}{2} \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\phi^2}{2I} = \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 p_i \frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{1}{2} \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) H_1,$$

also ist

$$\langle H_1 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (kT) + \frac{1}{2} kT = 2kT.$$

- (ii) Wir haben

$$H_1 = c \sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2} = c \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}} = \sum_{i=1}^3 p_i \frac{\partial}{\partial p_i} (c \sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}) = \sum_{i=1}^3 p_i \frac{\partial}{\partial p_i} H_1,$$

also ist

$$\langle H_1 \rangle = \sum_{i=1}^3 (kT) = 3kT.$$

- (iii) Da $\frac{\partial}{\partial q_j} (\sum_i q_i^2)^{m/2} = m q_j (\sum_i q_i^2)^{m/2-1}$, gilt

$$\begin{aligned} H_1 &= \kappa |\vec{p}|^m + \lambda |\vec{x}|^n = \kappa \left(\sum_{i=1}^d p_i^2 \right)^{m/2} + \lambda \left(\sum_{i=1}^d x_i^2 \right)^{n/2} \\ &= \frac{\kappa}{m} \sum_{j=1}^d \left[p_j \frac{\partial}{\partial p_j} \left(\sum_{i=1}^d p_i^2 \right)^{m/2} \right] + \frac{\lambda}{n} \sum_{j=1}^d \left[x_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_{i=1}^d x_i^2 \right)^{n/2} \right] \\ &= \left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^d p_j \frac{\partial}{\partial p_j} + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^d x_j \frac{\partial}{\partial x_j} \right) H_1, \end{aligned}$$

also ist

$$\langle H_1 \rangle = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^d kT + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^d kT = \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{n} \right) dkT.$$

Bei Fragen E-Mail an tabler.alexander@physik.uni-muenchen.de