Zentralübung

Thermodynamik und Statistische Physik (T4)

Lösungsskizze Blatt 9

WiSe 2019/20

Aufgabe 1: Ising Modell, kanonisches Ensemble

a) Wir haben verschiedene Lösungswege.

1. *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

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

Die erste zwei Zeilen der letzten Gleichung sind laut Induktionsannhame $\sum_{s_{N+1}} Z_N (e^{\beta J s_{N+1}} + e^{-\beta J s_{N+1}})$, 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

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

2. Rekursion. Wir haben:

$$\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{s_1,\dots,s_N} e^{\beta J(s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_N)} \\
&= \sum_{s_2,\dots,s_N} (e^{\beta J s_2} + e^{-\beta J s_2}) e^{\beta J(s_2 s_3 + \dots + s_{N-1} s_N)} \\
&= \sum_{s_2,\dots,s_N} 2\cosh(\beta J s_2) e^{\beta J(s_2 s_3 + \dots + s_{N-1} s_N)} \\
&= Z_{N-1} \left\langle 2\cosh(\beta J s_1) \right\rangle_{N-1}.
\end{aligned}$$

wo mit $\langle \cdot \rangle_N$ Erwartungswert bei einer offenen N-teiligen Kette gemeint ist und im letzten Schritt $(s_2, \dots, s_N) \mapsto (s_1, \dots, s_{N-1})$ umbenannt wurde. Wir rechnen rekursiv weiter indem wir Summationen explizit angeben:

$$
\begin{aligned}
Z_{N-1}\left\langle 2\cosh(\beta J s_1)\right\rangle_{N-1} &= 2\sum_{s_1,\dots,s_{N-1}} \cosh(\beta J s_1) e^{\beta J(s_1 s_2+\ldots+s_{N-2}s_{N-1})} \\
&= 2\cosh(\beta J)\sum_{s_2,\dots,s_{N-1}} 2\cosh(\beta J s_2) e^{\beta J(s_2 s_3+\ldots+s_{N-2}s_{N-1})} \\
&= 2\cosh(\beta J) Z_{N-2}\left\langle 2\cosh(\beta J s_1)\right\rangle_{N-2} \\
&= (2\cosh(\beta J)^{N-3} Z_2 \left\langle 2\cosh(\beta J s_1)\right\rangle_2
\end{aligned}
$$

wo wir von der zweiten zur dritten Zeile wieder $(s_2,\dots,s_{N-1}) \mapsto (s_1,\dots,s_{N-2})$ umbenannt haben. Zuletzt rechnen wir

$$
\begin{aligned}
Z_2\left\langle 2\cosh(\beta J s_1)\right\rangle_2 &= \sum_{s_1,s_2} 2\cosh(\beta J s_1) e^{\beta J s_1 s_2} = \sum_{s_1} 2\cosh(\beta J s_1)(e^{\beta J s_1} + e^{-\beta J s_1}) \\
&= \sum_{s_1} (2\cosh(\beta J s_1))^2 = 2(2\cosh(\beta J))^2.
\end{aligned}
$$

Substitution liefert

$$
Z_N = 2(2\cosh(\beta J))^{N-1}.
$$

b) **(Korrigierte Lösung.)**[1] Wir haben zwei Fälle:

Fall 1: $j = 1, N$.
Wir beweisen die folgende algemeinere Gleichung per Rekursion[2]:

$$
\left\langle f(s_1)\right\rangle_N = 0, \qquad f(x) \text{ ungerade Funktion.} \tag{1}
$$

Hier ist mit $\langle\cdot\rangle_N$ Erwartungswert bei einer offenen N-teiligen Kette gemeint. Die Gleichung zeigt insbesondere, dass $\langle s_1\rangle_N = 0$ [3].
Beweiss. Es gilt:

$$
Z_2\left\langle f(s_1)\right\rangle_2 = \sum_{s_1,s_2} f(s_1) e^{\beta J s_1 s_2} = \sum_{s_1} f(s_1)(e^{\beta J s_1} + e^{-\beta J s_1}) = 0.
$$

Rekursions-Schritt:

$$
\begin{aligned}
Z_N\left\langle f(s_1)\right\rangle_N &= \sum_{s_1,\dots,s_N} f(s_1)\exp\left[\beta J\sum_{k=1}^{N-1} s_k s_{k+1}\right] \\
&= f(1)\sum_{s_2,\dots,s_N} (e^{\beta J s_2} - e^{-\beta J s_2})\exp\left[\beta J\sum_{k=2}^{N-1} s_k s_{k+1}\right] \\
&= f(1)\sum_{s_1,\dots,s_{N-1}} (e^{\beta J s_1} - e^{-\beta J s_1})\exp\left[\beta J\sum_{k=1}^{N-2} s_k s_{k+1}\right] \\
&= f(1) Z_{N-1}\left\langle 2\sinh(\beta J s_1)\right\rangle_{N-1}
\end{aligned}
$$

wo wir $(s_2,\dots,s_N) \mapsto (s_1,\dots,s_{N-1})$ umbenannt haben. Da, $\sinh(x)$ ungerade ist, haben wir durch Rekursion

$$
\left\langle f(s_1)\right\rangle_N = \frac{f(1)}{Z_N}(2\sinh(\beta J))^{N-3}\cdot Z_2\left\langle \sinh(s_1)\right\rangle_2 = 0,
$$

und die Gleichung (1) ist bewiesen.

[1] Vielen Dank an J.K. fürs Bemerken.
[2] Man kann analog zur Rekursionslösung für 1a), auch beweisen, dass $\langle f(s_1)\rangle_N = f(1)$ für gerade Funktion f.
[3] Per Symmetrie, (oder Umbenennung) gilt auch $\langle f(s_N)\rangle_N = 0$.

Fall 2: $1 < j < N$:

Wir fixieren hilfreiche Notation. Sei $I_n = \{1, \dots, n\}$ und $I_{(n,\sigma)} \coloneqq I_n \setminus \sigma$, $\sigma \subset I_n$ 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:

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

Wir können jetzt Summationen über Paare $(j-1, j+1)$ und weitere Paare explizit angeben

$$\begin{aligned} Z_N \langle s_j \rangle = & \sum_{s_i, i \in I_{(N,\{j-1,\dots,j+1\})}} \Big[(e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}) e^{\beta J(s_{j-2}+s_{j+2})} + (e^{-2\beta J} - e^{2\beta J}) e^{-\beta J(s_{j-2}+s_{j+2})} \\ & \qquad + (e^0 - e^0) e^{\cdots} + (e^0 - e^0) e^{\cdots}\Big] \cdot \exp\left[\beta J \sum_{k \in I_{(N-1,\{j-2,\dots,j+1\})}} s_k s_{k+1}\right] \\ = & \, 2\sinh(2\beta J) \sum_{s_i, i \in I_{(N,\{j-1,\dots,j+1\})}} \left(e^{\beta J(s_{j-2}+s_{j+2})} - e^{-\beta J(s_{j-2}+s_{j+2})}\right) \cdot \exp\left[\beta J \sum_{k \in I_{(N-1,\{j-2,\dots,j+1\})}} s_k s_{k+1}\right] \\ = & \, (2\sinh(2\beta J))^2 \sum_{s_i, i \in I_{(N,\{j-2,\dots,j+2\})}} \left(e^{\beta J(s_{j-3}+s_{j+3})} - e^{-\beta J(s_{j-3}+s_{j+3})}\right) \cdot \exp\left[\beta J \sum_{k \in I_{(N-1,\{j-3,\dots,j+2\})}} s_k s_{k+1}\right] \\ = & \cdots \end{aligned}$$

In der ersten Zeile dieser Gleichung stehen 4 Terme, die genau zu den Konfigurationen $(s_{j-1}, s_{j+1}) \in \{(+1,+1),\ (-1,-1),\ (+1,-1),\ (-1,+1)\}$ gehören. Die Konfigurationen $(\pm 1, \mp 1)$ tragen nicht bei. Jeder weiterer Schritt ergibt ein Faktor $2\sinh(2\beta J)$.

Wir können jetzt (oBdA) annehmen, dass j näher zur Position 1 als zur Position N ist, also dass $1 \le j \le N/2$. Dann summieren wir explizit einschließlich bis zum Paar (s_2, s_{2j-2}), und die "kleine" Positionen $1, 2, \dots$ tauchen nicht mehr im Boltzmann-Faktor auf:

$$\begin{aligned} Z_N \langle s_j \rangle &= (2\sinh(2\beta J))^{j-2} \sum_{s_1, s_{2j-1}, \dots, s_N} \left(e^{\beta J(s_1+s_{2j-1})} - e^{-\beta J(s_1+s_{2j-1})}\right) \cdot \exp\left[\beta J \sum_{k=2j-1}^{N-1} s_k s_{k+1}\right] \\ &= (2\sinh(2\beta J))^{j-2} \sum_{s_{2j}, \dots, s_N} \Big[(e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}) e^{\beta J s_{2j}} + (e^{-2\beta J} - e^{2\beta J}) e^{-\beta J s_{2j}} \\ &\qquad + (e^0 - e^0) e^{\cdots} + (e^0 - e^0) e^{\cdots}\Big] \cdot \exp\left[\beta J \sum_{k=2j}^{N-1} s_k s_{k+1}\right] \end{aligned}$$

In der zweiten Zeile haben wir die letzte doppelte Summation über (s_1, s_{2j-1}) explizit angegeben, und die 4 Terme korrespondieren zu den Konfigurationen $\{(\pm 1, \pm 1),\ (\pm 1, \mp 1)\}$. Es bleibt nach eine Umbenennung $(s_{2j}, \dots, s_N) \mapsto (s_1, \dots, s_{N-2j+1})$

$$\begin{aligned} Z_N \langle s_j \rangle &= (2\sinh(2\beta J))^{j-1} \sum_{s_{2j}, \dots, s_N} \left(e^{\beta J s_{2j}} - e^{-\beta J s_{2j}}\right) \cdot \exp\left[\beta J \sum_{k=2j}^{N-1} s_k s_{k+1}\right] \\ &= (2\sinh(2\beta J))^{j-1} \sum_{s_1, \dots, s_{N-2j+1}} \left(e^{\beta J s_1} - e^{-\beta J s_1}\right) \cdot \exp\left[\beta J \sum_{k=1}^{N-2j} s_k s_{k+1}\right] \\ &= (2\sinh(2\beta J))^{j-1} Z_{N-2j+1} \langle 2\sinh(\beta J s_1) \rangle_{N-2j+1} \\ &= 0, \end{aligned}$$

wo wir die Gleichung (1) benutzt haben.

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

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

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:

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

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

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

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 9.2: Dipole

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

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

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:

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

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

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

Im Limes $T \to \infty$ ist $\coth(x) = \frac{1}{x} + \ldots$ $(x \ll 1)$, und wir erhalten $U \simeq \frac{5}{2}NkT$ wie erwartet.

d) Wir bemerken, dass

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

also ist

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

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

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

und die Skizze Für den Grenzfäll $\mathcal{E} \ll \frac{kT}{\mu}$ berechnen wir die Laurent-Reihe von $\mathcal{P}$ zur

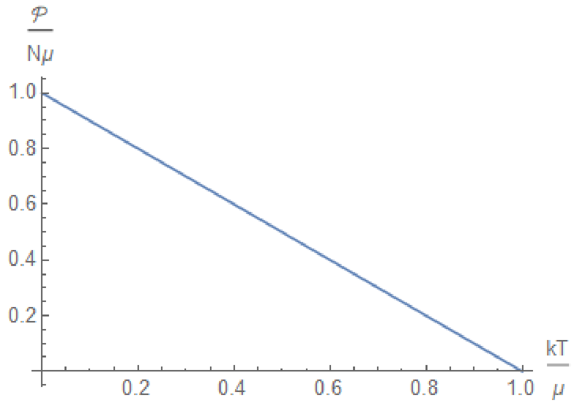

Abbildung 1: $\mathcal{E} = 1$

führende Ordnung:

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

also haben wir

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

und die Skizze

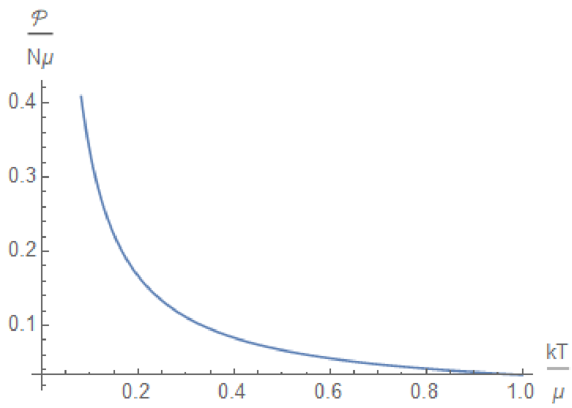

Abbildung 2: $\mathcal{E} = 0.1$

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

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

Eine nötige Annahme im Fall des kanonischen Ensembles ist dass der Randbeitrag im Phasen Raum 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 $x\frac{\partial}{\partial x}x^n = nx^n$, haben wir dass

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

also ist

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

(ii) Wir haben

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

also ist

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

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

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

also ist

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