17 Gibbs Paradoxon

Ohne den Faktor $1/N!$ für ununterscheidbare Teilchen lautet das Phasenraumvolumen für $H(\underline{q},\underline{p}) \leqslant E$ im idealen Gas mit N Teilchen im Volumen V

$$\Phi(E) = \frac{V^N}{h^{3N}} \frac{(2\pi m E)^{\frac{3N}{2}}}{(3N/2)!}.$$

Der verbleibende Term $(3N/2)!$ kommt von der Gamma-Funktion für das Volumen der $3N$ dimensionalen Kugel und N sei gerade. Zeige, dass mit obigem Phasenraumvolumen folgender Prozess eine nichtverschwindende Entropieänderung hat: zwei isolierte Teilsysteme mit dem gleichen Gas und $E_1 = E_2, V_1 = V_2, N_1 = N_2$ werden miteinander verbunden und können sich mischen. Das Gesamtsystem bleibt isoliert.

18 e-Ink

Wir betrachten eine e-Ink Anzeige bestehend aus N kleinen Kugeln. Eine Hälfte jeder Kugel ist schwarz, die andere weiß. Jede Kugel sei ein unverschiebbarer aber frei drehbarer elektrischer Dipol mit Dipolmoment $d_0\hat{\boldsymbol{q}}_n$ in einem externen elektrischen Feld $E_0\hat{\boldsymbol{z}}$. Wir nehmen an, dass die Hamiltonfunktion nur von den Richtungsvektoren der Dipole $\hat{\boldsymbol{q}}_n$ abhängt:

$$H(\underline{q}) = -E_0 d_0 \sum_{n=1}^{N} \hat{\boldsymbol{z}} \cdot \hat{\boldsymbol{q}}_n \qquad \text{mit } \underline{q} = (\hat{\boldsymbol{q}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{q}}_N) \text{ und } |\hat{\boldsymbol{q}}_n| = 1.$$

Die Abhängigkeit von den Drehimpulsen vernachlässigen wir, da wir nur an konfigurationsabhängigen Erwartungswerten $A(\underline{q})$ interessiert sind.

(a) Zeige, dass die kanonische Zustandssumme über den Konfigurationsraum gegeben ist durch

$$Z(\beta, E_0, N) = \int d^{3N}q \prod_{n=1}^{N} \delta\left(|\boldsymbol{q}_n| - 1\right) \exp\{-\beta H(\underline{q})\} = \left(\frac{4\pi \sinh(\beta E_0 d_0)}{\beta E_0 d_0}\right)^N.$$

Warum fehlt der Faktor $1/N!$ in der Zustandssumme? h sei 1.

(b) Um einen beliebigen konfigurationsabängigen Ensemble-Erwartungswert

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(\beta, E_0, N)} \int d^{3N}q \prod_{n=1}^{N} \delta\left(|\boldsymbol{q}_n| - 1\right) A(\underline{q}) \exp\{-\beta H(\underline{q})\}$$

zu berechnen, können wir eine parametrisierte Hamiltonfunktion einführen $H_\lambda(\underline{q}) = H(\underline{q}) + \lambda A(\underline{q})$ mit dem frei wählbaren Parameter λ. Zeige, dass der Erwartungswert $\langle A \rangle$ dann mit Hilfe der λ-parametrisierten Zustandssumme $Z_\lambda(\beta, E_0, N)$ für diese Hamiltonfunktion durch

$$\langle A \rangle = \left.\frac{\partial F_\lambda(\beta, E_0, N)}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0}$$

mit $F_\lambda = -\beta^{-1} \log Z_\lambda$ gefunden werden kann.

(c) Benutze die Methode aus (b) um den Erwartungswert der durchschnittlichen Ausrichtung in z-Richtung, $\langle z \rangle$, mit $z(\underline{q}) = \sum_n \hat{\boldsymbol{z}} \cdot \hat{\boldsymbol{q}}_n / N$ zu finden, der angibt, wie schwarz oder weiß die Pixel wirklich sind, wenn sie mit der elektrischen Feldstärke $\pm E_0$ angesteuert werden. Zeige $\langle z \rangle = \coth(\beta E_0 d_0) - (\beta E_0 d_0)^{-1}$ und skizziere $\langle z \rangle$ als Funktion von $\beta E_0 d_0$.

19 Magnetische Kugeln

Wir betrachten $N = 4$ ununterscheidbare magnetische Kugeln auf $V = 4$ Feldern. Die Position der n-ten Kugel sei vollständig durch die Angabe der Feldnummer $q_n \in \{1, \ldots, 4\}$ bestimmt und wir vernachlässigen deren Impulsbeiträge. Bis zu 4 Kugeln können jedoch das gleiche Feld besetzten und einen magnetisch verbundenen Cluster bilden. Jedes verbundene Paar von Kugeln hat die Bindungsenergie U. Die Hamiltonfunktion ist diskret und lautet

$$H(\underline{q}) = -U \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=n+1}^{N} \delta_{q_n q_m} \quad \text{mit } \underline{q} = (q_1, \ldots, q_N), q_n \in \{1, \ldots, V\}$$

und dem Kronecker-Delta $\delta_{ij} = 1$ für $i = j$ und 0 sonst.

(a) Skizziere alle 5 Möglichkeiten, die Kugeln in Cluster einzuteilen und finde zu jeder davon die Anzahl der möglichen Anordnungen, diese Cluster von Kugeln auf die Felder zu verteilen.

(b) Werte die Hamiltonfunktion für jede der 5 Möglichkeiten aus und zeige damit, dass die kanonische Zustandssumme über den Konfigurationsraum als Funktion von $\xi = \beta U$ gegeben ist durch $4e^{6\xi} + 12e^{3\xi} + 6e^{2\xi} + 12e^{\xi} + 1$.

(c) Zeige, dass der Erwartungswert der Anzahl an besetzten Feldern $\langle B \rangle$ mit

$$B(\underline{q}) = V - \sum_{i=1}^{V} \prod_{n=1}^{N} (1 - \delta_{iq_n})$$

gegeben ist durch $(4e^{6\xi} + 24e^{3\xi} + 12e^{2\xi} + 36e^{\xi} + 4)/Z(\xi)$. Skizziere die Funktion und finde den Grenzwert verschwindender magnetischer Bindung $U \to 0$.

20 Wechselwirkende klassische Spin Kette

Gegeben sei eine Kette aus N Spins $(\sigma_1, \ldots, \sigma_N)$ mit $\sigma_i = \pm 1$. Die Hamiltonfunktion lautet

$$H_{B,J}(\sigma_1, \ldots, \sigma_N) = -B \sum_{i=1}^{N} \sigma_i - J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1}.$$

B und J geben jeweils die Wechselwirkung mit dem äußeren Magnetfeld und zwischen benachbarten Spins an. Die Randbedingungen seien periodisch mit $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

(a) Zeige, dass die kanonische Zustandssumme für die nicht-wechselwirkende Kette mit $J = 0$ im äußeren Magnetfeld B gegeben ist durch $Z_{B,J=0}(\beta, N) = (2 \cosh \beta B)^N$.

(b) Sei $\tau_i = \sigma_i \sigma_{i+1}$ das Produkt zweier benachbarter Spins. τ_i ist also negativ, wenn sich die benachbarten Spins σ_i und σ_{i+1} in der Richtung unterscheiden und sonst positiv. Zeige, dass $(\sigma_1, \ldots, \sigma_N)$ und $(\sigma_1, \tau_1, \ldots, \tau_{N-1})$ äquivalente Koordinaten des Konfigurationsraumes sind. D.h. es existiert eine bijektive Abbildung zwischen diesen Koordinaten. Verwende die Koordinaten τ_i, um folgende Abschätzung für die Zustandssumme $Z_{B=0,J}(\beta, N)$ der wechselwirkenden Spinkette ohne äußerem Feld zu zeigen:

$$\frac{e^{-\beta J}}{\cosh \beta J} Z_{J,0}(\beta, N) \leqslant Z_{B=0,J}(\beta, N) \leqslant \frac{e^{+\beta J}}{\cosh \beta J} Z_{J,0}(\beta, N).$$

(c) Zeige damit, dass die freie Energie pro Spin $f_{B=0,J}(\beta, N) = F_{B=0,J}(\beta, N)/N$ im thermodynamischen Limes für $N \to \infty$ gegeben ist durch $-\beta^{-1} \log(2 \cosh \beta J)$. Finde danach den Limes von $f_{B=0,J}(\beta, N \to \infty)$ für $T \to 0$ und skizziere je eine mögliche Konfiguration bei $T = 0$ für $J > 0$ und für $J < 0$.

Formelsammlung:

$$\int d^3q\, \delta(|\boldsymbol{q}| - 1) = \int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \sin \vartheta \qquad \text{(Integral über die Einheitssphäre)}$$