Prof Dr. R. Kree
Dr. A. Hartmann

Übungen zur Thermodynamik und Statistik

Abgabe am Montag, den 29. April 2002, 11:00 Uhr (Übungskästen)

Achtung, Achtung:

Wegen mangelnder Nachfrage (ein Anwesender) wird die Übungsgruppe 3 (Mi 13:15 - 14:45, neuer Seminarraum) auf Vormittags 9.15 verlegt. (es kamen ja sehr viele zusätzlich in die Gruppe 1). Bitte alle in Gruppe 3 eingetragenen (bzw. weitere Interessenten, wenn es nicht zu viele sind) nächsten Mittwoch in die Gruppe 1 gehen (also wie gewohnt :-), dort wird dann bekanntgegeben wo die Gruppe 3 stattfindet (wahrscheinlich in der Mathematik).

Aufgabe 6: N harmonische Oszillatoren (17 Punkte)
Betrachten Sie ein System von N unterscheidbaren harmonischen Oszillatoren mit Masse m und Frequenz ω. Die Energie des Systems mit M Quanten ist:

$$E = \frac{1}{2} N\hbar\omega + M\hbar\omega \tag{1}$$

a. Berechnen Sie die Anzahl $\Omega(E)$ der Zustände mit Energie E. *3 Punkte*
TIP: Stellen Sie sich vor, Sie verteilen M Quanten auf N Oszillatoren, indem Sie $N-1$ Trennwände zwischen die aufgereihten Quanten stellen.

b. Berechnen Sie die Entropie für große M, N, verwenden Sie dabei die Stirling Formel. *3 Punkte*

c. Berechnen Sie die Temperatur T und zeigen Sie damit, dass $E(T) = \frac{N\hbar\omega}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)} + \frac{1}{2}N\hbar\omega$. *3 Punkte*

d. Berechnen Sie die Wärmekapazität $C_N = \frac{\partial E}{\partial T}$. Was ergibt sich für C_N für $T \to 0$ und für $T \to \infty$? *4 Punkte*

e. Plotten Sie für $N = 100$ und $\hbar\omega = 1$, $k_B \equiv 1$ (z.B. mit `gnuplot`) einmal $E(T)$ sowie in einem zweiten Plot $C_N(T)$ zusammen mit den endlichen Differenzen $(E(T+\Delta T) - E(T))/\Delta T$ (was numerisch gesehen eine grobe Nährung für die ABleitung ist) für $\Delta T = 0.1, 0.001$ im Bereich $T = [0, 2]$. *4 Punkte*

Aufgabe 7 Spinkette (18 Punkte)
Betrachten Sie das folgenden Modell für einen Ferromagneten, eine klassische Kette von $N+1$ Ising-Spins $\{s_i\}$ im äußeren Feld B mit Hamiltonfunktion

$$H(s) = -\sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} - B \sum_{i=0}^{N-1} s_i \tag{2}$$

Dabei sei der $N+1$-te Spin fixiert auf $s_n = 1$. Das Produkt $s_i s_{i+1}$ heißt die i-te *Bond*. Die i-te Bond heißt *gebrochen* falls $s_i \neq s_{i+1}$.
Im folgenden sei $B = 0$.

a. Malen Sie für $N = 10$ drei verschiedene Spinkonfigurationen auf. Symbolisieren Sie die Bonds durch Striche zwischen den Spins, z.B. $\uparrow - \uparrow - \downarrow - \ldots$. Markieren Sie die gebrochenen Bonds. Wieviele Spinkonfigurationen entsprechen einer Konfiguration von gebrochenen/ungebrochenen Bonds? 2 Punkte

b. Wieviele Zustände mit G gebrochenen Bonds gibt es? 2 Punkte

c. Berechnen Sie die Energie $H(s)$ eines Zustandes s mit $G(s)$ gebrochenen Bonds. 2 Punkte

d. Begründen Sie, warum 2 Punkte

$$\Omega(E) = \binom{N}{\frac{E}{2} + \frac{N}{2}} \tag{3}$$

die Anzahl der Zustände zu vorgegebener Energie E ist.

e. Berechnen Sie die spezifische Entropie im thermodynamischen Limes, d.h. 10 Punkte

$$s(\epsilon) = \lim_{N \to \infty} \frac{k_B}{N} \log \Omega(\epsilon N), \tag{4}$$

daraus die Temperatur

$$T(\epsilon)^{-1} = \frac{\partial s(\epsilon)}{\partial \epsilon}, \tag{5}$$

Ermitteln Sie dann die spezifische Energie $\epsilon(T)$ und daraus die spezifische Wärme

$$c(T) = \frac{\partial \epsilon(T)}{\partial T}. \tag{6}$$

Plotten Sie (z.B. mit `gnuplot`) $\epsilon(T)$ und $c(T)$ für $k_B \equiv 1$.

TIP 1: Verwenden Sie die Stirling Formel $n! \approx n^n \exp^{-n}$. Berechnen Sie damit $\binom{n}{an}$ für großes n und beliebigen Faktor a.
TIP 2: Verwenden Sie $0.5 \log \frac{1+x}{1-x} = \operatorname{arctanh}(x)$ für $|x| < 1$.

Hinweis: Bitte achten Sie darauf, dass Ihre Lösungen stets mit Ihrem **Namen** und der **Name des Leiters und Nummer Ihrer Übungsgruppe** beschriftet und zusammengeheftet sind. Werfen Sie die Lösungen am Montag jeweils bis spätestens 11:00 Uhr in die dafür bestimmten Kästen ein! Die Kästen werden um diese Zeit geleert, und die Lösungen unmittelbar an die Leiter der einzelnen Übungsgruppen weitergegeben. Senden Sie bis zum gleichen Zeitpunkt Ihre erstellten Programme per email an Ihren Betreuer.

Aufgabe 8: Zustandssumme Spinkette (26 Punkte)
Projektaufgabe: Zwei Wochen Bearbeitungszeit. Abgabe 6. Mai
Betrachten Sie wieder die Kette mit Hamiltonfunktion (**??**), diesmal aber mit N Spins, und Spin 0 sei der rechte Nachbar von Spin $N-1$, d.h. alle Nachbarn verstehen sich Modulo N (*periodische Randbedingungen*).

a. Zeigen Sie, dass im kanonischen Ensemble für die Magnetisierung $m \equiv \langle s \rangle \equiv \frac{1}{N}\langle s_i \rangle$ gilt: *2 Punkte*

$$m = -\frac{1}{N}\frac{\partial}{\partial B}F(T,B) \qquad (7)$$

wobei $F(T,B) = -k_B T \log Z$ die freie Energie und Z die kanonische Zustandssumme ist.

b. Wie verhält sich die Rechenzeit eines naiven Verfahrens für das Berechnen von Z als Funktion von N asymptotisch? *2 Punkte*

c. Erstellen Sie ein C Programm, das die Magnetisierung als Funktion der Temperatur im Bereich $T = 0.1, 0.2, \ldots 2$ ermittelt. Berechnen Sie dabei die Zustandssumme durch Aufzählung aller Zustände! Berechnen Sie im Programm die Ableitung numerisch als endliche Differenz $[-F(T,B) + F(T,0)]/(NB)$. Verwenden Sie $k_B \equiv 1$. *15 Punkte*

Das Programm soll in der folgenden Form aufrufbar sein:

```
partition <N> <B>
```

TIP: Programmieren Sie die Aufzählung aller Konfigurationen mittels eine Schleife von 0 *bis* $2^N - 1$ *(DRUCKFEHLER IN DER ALTEN VERSION), und wandeln Sie dann den Schleifenzähler* t *in eine Binärzahl um, die Sie dann als Spinkonfiguration interpretieren:* $s_i = 2[(t/2^i) \bmod 2] - 1$ für $i = 0, 1, \ldots, N-1$, wobei das in C Code `2*((t >> i)%2) -1` lautet.

d. Was ist $Z(T,B)$ für $N = 2$? *2 Punkte*
Nutzen Sie das Ergebnis um Ihr Programm zu testen, indem Sie sich die Ergebnisse von Z für verschiedene T, B bei $N = 2$ ausgeben lassen und vergleichen.

e. Lassen Sie das Programm für $N = 10$ und $B = 10^{-1}, 10^{-2}, \ldots, 10^{-5}$ laufen. und plotten Sie die Kurven $m(T)$ für die verschiedenen Werte von B mit logarithmischer y-Achse. Was schließen Sie aus dem Ergebnis? *5 Punkte*