UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Statistischen Mechanik
Wintersemester 2007/08

Übungsblatt 6, Ausgabe 27.11.2007, abzugeben bis 03.12.2007

Präsenzaufgaben

30. **Kanonische Verteilungsfunktion mit Hilfe von Lagrange Multiplikatoren**

(a) Es werde ein Extremum einer Funktion $V(\mathbf{r})$ gesucht mit $\mathbf{r} \in \mathbf{R}^{\mathbf{n}}$ unter einer Nebenbedingung $g(\mathbf{r}) = 0$. Machen Sie sich klar dass folgende Gleichungen im Extremum $\mathbf{r}^*$ erfüllt sein müssen:

$$\nabla \left(V(\mathbf{r}) + \lambda g(\mathbf{r})\right)\big|_{\mathbf{r}} = \mathbf{r}^* = 0$$
$$g(\mathbf{r} = \mathbf{r}^*) = 0$$

(b) Bestimmen Sie die Verteilungsfunktion P_i (d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass das System im i-ten Energieniveau ist) eines Systems, das an ein Wärmereservoir angeschlossen ist. Maximieren Sie hierzu die Entropie $S\{P_i\} = -k_B \sum_i P_i \ln P_i$ unter der Nebenbedingung der Normierung $\sum_i P_i = 1$ und der durch das Reservoir vorgegebenen mittleren Energie $\langle E \rangle = \sum_i E_i P_i$.

31. **Ehrenfestsches Urnenmodell**
Die Annäherung eines isolierten Vielteilchensystems an die thermische Gleichgewichtsverteilung kann explizit nur in stark vereinfachten Modellen studiert werden. Das Urnenmodell der Ehrenfests betrachtet zwei Urnen, in denen sich N Teilchen befinden. In jedem Zeitschritt wird rein zufällig eines der N Teilchen ausgewählt und in die *andere* Urne verfrachtet. Die Anzahl der Teilchen in einer der beiden Urnen (es sei die linke) sei $n(i)$ nach dem i–ten Zeitschritt; der Anfangswert ist $n(0) = n_0$.

(a) Diskutieren Sie (qualitativ) zunächst im Falle $i \to \infty$ also im Gleichgewicht:

(b) Welchen Wert sollte $\langle n \rangle_{i \to \infty}$ annehmen?

(c) Wie sieht die Gleichgewichtsverteilung $p^{eq}(n)$ aus?

(d) Sei $p(n, i)$ die Wahrscheinlichkeit nach dem i–ten Zeitschritt, dass n Teilchen in der linken Hälfte sind.

(e) Leiten Sie eine Rekursion, für $p(n, i)$ her. Dabei soll die Verteilung vor der Teilchenverschiebung also zum Zeitpunkt $i - 1$ eingehen.

(f) Schreiben Sie die Rekursionsformel um zu:

$$p(n, i) = \textstyle\sum_{m=0}^{N} q(n, m)\, p(m, i-1)$$

Mit einer Matrix $q(n, m)$, die Übergangsmatrix genannt wird.

(g) Die Gleichgewichtsverteilung muss stationär sein, d.h. sie darf sich unter weiteren Übergängen nicht mehr verändern:

$$p^{\mathrm{eq}}(n) = \sum_{m=0}^{N} q(n,m)\, p^{\mathrm{eq}}(m)$$

Zeigen Sie, dass die in 31c gefundene Verteilung stationär ist.

schriftlich

32. **Ideales Gas im relativistischen Grenzfall (4 Punkte)**
Bewegen sich die N Teilchen eines idealen Gases im Volumen V mit (ultra–) relativistischen Geschwindigkeiten, so lautet die Hamiltonfunktion des i–ten Teilchens:

$$E_i = c|\mathbf{p}_i|$$

(a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme Z, indem Sie im Phasenraum über alle Positions– und Impulsfreiheitsgrade integrieren.

(b) Bestimmen Sie den Druck als Funktion der Energiedichte $\langle E\rangle/V$ und die Zustandsgleichung $P = P(V/N, T)$.

33. **Thermische Fluktuationen und Suszeptibilitäten (8 Punkte)**
In Aufgabe 10 wurde die folgende Operatoridentität gezeigt:

$$\frac{d}{d\lambda}\exp(A(\lambda)) = \int_0^1 dx \exp(xA(\lambda))\frac{dA}{d\lambda}\exp((1-x)A(\lambda)),$$

welche für einen beliebigen Operator $A(\lambda)$ gilt, der von einem Parameter λ abhängt.

(a) Zeigen Sie, dass für einen Hamiltonoperator H_λ, der von einem Parameter λ abhängt, obige Beziehung äquivalent ist zu:

$$\frac{d}{d\lambda}e^{-\beta H_\lambda} = -\int_0^\beta d\xi\, \left(\frac{\partial\, H_\lambda}{\partial\lambda}(i\hbar\xi)\right)\, e^{-\beta H_\lambda},$$

wobei die Zeitentwicklung eines Operators im Heisenbergbild Verwendung findet:

$$\frac{\partial H_\lambda}{\partial\lambda}(t) = e^{iH_\lambda t/\hbar}\left(\frac{\partial H_\lambda}{\partial\lambda}\right)e^{-iH_\lambda t/\hbar}$$

(b) Zeigen Sie mit der Relation von (a) und der Definition der Zustandssumme, $Z(\lambda) = \mathrm{Sp}\, e^{-\beta H_\lambda}$, dass gilt:

$$\frac{d}{d\lambda}\left(-\frac{1}{\beta}\ln(Z(\lambda))\right) = \langle\frac{\partial H_\lambda}{\partial\lambda}\rangle.$$

(c) Sei der Hamiltonoperator linear im Parameter λ, speziell: $H_\lambda = H_0 - \lambda A$. Man definiert dann die (isotherme) B-A- Suszeptibilität:

$$\chi_{BA}(\lambda) = \frac{d\langle B\rangle}{d\lambda} = \int_0^\beta d\xi\, \langle\Delta B\, \Delta A(i\hbar\xi)\rangle \tag{1}$$

mit $\Delta A = A - \langle A \rangle$ und der Zeitabhängigkeit eines Operators im Heisenbergbild. Zeigen Sie Formel (1), die thermodynamische Ableitungen mit thermischen Fluktuationen verknüpft. Zeigen Sie, dass im klassischen Grenzfall oder falls $[A, H_\lambda] = 0$ oder $[B, H_\lambda] = 0$ gilt, folgt

$$\chi_{BA}(\lambda) = \frac{1}{k_B T} \langle \Delta B \, \Delta A \rangle.$$

(d) Betrachtet man $-\lambda A$ als kleine Störung zum ungestörten System mit Hamiltonoperator H_0, so geben die Suszeptibilitäten bei $\lambda = 0$ die lineare Antwort des Systems auf die kleine Störung. Die Matrix der isothermen Suszeptibilitäten definiert dann ein Skalarprodukt: man schreibt nach Mori $(B|A) = \chi_{BA}(\lambda = 0)$. Verwenden Sie zur Vereinfachung eine Matrixdarstellung und nehmen Sie hermitesche Operatoren A und B an, um folgende Eigenschaften nachzuweisen; $(B|A)$ ist symmetrisch, reell und $(A|A)$ ist nicht-negativ. Wann gilt $(A|A) = 0$?

34. **2–Niveausystem: Suszeptibilitäten (6 Punkte)**
In Fortsetzung unserer Arbeit am Zwei-Niveau-System, welches durch den Hamiltonoperator

$$H = -h\,\sigma_z - t\,\sigma_x$$

definiert wurde, sollen nun die Suszeptibilitäten bestimmt werden.

(a) Die transversale Suszeptibilität $\chi_\perp$ sei definiert durch

$$\chi_\perp = \left(\frac{\partial \langle \sigma_x \rangle}{\partial t} \right)_{t=0}$$

Bestimmen Sie $\chi_\perp$ für ein Zweiniveausystem im thermischen Gleichgewicht mit einem Wärmebad zur Temperatur T (d.h. mit dem kanonischen Dichteoperator).

(b) Skizzieren Sie $\chi_\perp$ als Funktion der Temperatur und diskutieren Sie die Grenzfälle für $k_B T \gg h$ und $k_B T \ll h$

(c) Die longitudinale Suszeptibilität $\chi_\parallel$ sei definiert durch:

$$\chi_\parallel = \left(\frac{\partial \langle \sigma_z \rangle}{\partial h} \right)_{t=0}$$

Kommt Ihnen das Ergebnis bekannt vor?

35. **Ehrenfestsches Urnenmodell II (6 Punkte)**
N Kugeln werden auf zwei Urnen verteilt. In jedem Zeitschritt wird rein zufällig eine der N Kugeln ausgewählt und in die *andere* Urne verfrachtet. Die Rekursionsformel für die Wahrscheinlichkeit $p(n,i)$, dass nach dem i-ten Schritt n Kugeln in der linken Urne sind, lautet:

$$p(n,i) = \sum_{m=0}^{N} q(n,m)\, p(m, i-1)$$

Die Matrix der $q(n,m)$ heißt Übergangsmatrix, und es gilt:

$$q(n,m) = \begin{cases} \frac{m}{N} & \text{für } n = m-1 \\ 1 - \frac{m}{N} & \text{für } n = m+1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

(a) Zeigen Sie, dass die Gleichgewichtsverteilung $p^{\mathrm{eq}}(n)$ und die Übergangsraten $q(n, m)$ die Mikroreversibilitätsbedingung ('detailed balance') erfüllen:

$$q(n, m)\, p^{\mathrm{eq}}(m) = q(m, n)\, p^{\mathrm{eq}}(n) \ ,$$

(b) Zeigen Sie, dass aus der Mikroreversibilitäsbedingung folgt, dass die Dynamik des Systems in der Nähe des Gleichgewichts zeitumkehrinvariant ist in folgendem Sinne:
Die bedingte Wahrscheinlichkeit, im $i+1$-ten Schritt von m nach n K ugeln in der linken Urne zu kommen, ist gleich gross wie die bedingte Wahrscheinlichkeit, im i-ten Schritt von n Kugeln nach m gekommen zu sein; d.h.:

$$P(n, i+1|m, i) = P(n, i-1|m, i)$$

Hinweis: Während die linke Seite einfach zu finden ist, benötigen Sie für die rechte Seite eine gemeinsame Wahrscheinlichkeit und dass $p(m, i-1)/p(n, i)$ mit $p^{\mathrm{eq}}(n)$ berechnet werden kann.

(c) Der zeitabhängige Mittelwert sei definiert durch

$$\langle n \rangle_i = \sum_{n=0}^{N} p(n, i)\, n$$

Leiten Sie die Rekursionsformel

$$\langle n \rangle_i = 1 + \left(1 - \frac{2}{N}\right) \langle n \rangle_{i-1}$$

ab, in dem Sie die Übergangsmatrix $q(n, m)$ verwenden, und nähern Sie diese Differenzengleichung durch eine gewöhnliche Differentialgleichung. Wie lautet deren Lösung mit dem Anfangswert $\langle n \rangle_0 = n_0$? Wie verhält sich das Ergebnis für lange Zeiten?