

Theoretische Physik F: Zwischenklausur SS 12

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Dr. Igor GornyiLösungen
Besprechung 18.05.2012

1. Quickies:

(30 Punkte)

- (a)
- Was besagt der 0. Hauptsatz der Thermodynamik?*

Antwort: Es existiert ein thermodynamisches Gleichgewicht, das durch die Temperatur charakterisiert ist.

Wenn A im thermischen Gleichgewicht mit B ist und B im thermischen Gleichgewicht mit C, so ist A auch mit C im thermischen Gleichgewicht

- (b)
- Betrachten Sie ein System von nichtwechselwirkenden klassischen harmonischen Oszillatoren in vier Dimensionen. Wie lautet die innere Energie im thermischen Gleichgewicht als Funktion der Temperatur, der Teilchenzahl und des Volumens?*

Antwort: Der Hamilton Operator lautet:

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{n=1}^N \left(\frac{\vec{p}_n^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \vec{x}_n^2 \right) \quad \text{mit } \vec{p}_n, \vec{x}_n = \begin{pmatrix} p_{n,1} \\ p_{n,2} \\ p_{n,3} \\ p_{n,4} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_{n,1} \\ x_{n,2} \\ x_{n,3} \\ x_{n,4} \end{pmatrix} \\
&= \underbrace{\sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^4}_{4N \times} \underbrace{\left(\frac{p_{n,i}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_{n,i}^2 \right)}_{2 \text{ quadratische Freiheitsgrade}}
\end{aligned}$$

Wir haben also $f = 8N$ quadratische Freiheitsgrade im System. Nach dem Gleichverteilungssatz wissen wir, dass jeder quadratische Freiheitsgrad eine mittlere Energie von $k_B T/2$ besitzt und damit:

$$U = 8N \frac{k_B T}{2} = 4N k_B T$$

- (c)
- Bestimmen Sie die mittlere innere Energie des klassischen, nichtrelativistischen idealen Gases in zwei Dimensionen als Funktion der Temperatur, der Teilchenzahl und des Volumens.*

Antwort: Der Hamilton Operator lautet hier:

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^2 \frac{p_{n,i}^2}{2m}$$

und damit wieder nach dem Gleichverteilungssatz:

$$U = 2N \frac{k_B T}{2} = N k_B T$$

- (d) *Wie lautet die thermische De-Broglie-Wellenlänge des ultra-relativistischen idealen Gases.*

Antwort: Die De-Broglie-Wellenlänge ist in 3D definiert über:

$$\frac{1}{\lambda^3} = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta H(p)} \quad (1)$$

weil im ultrarelativistischen Grenzfall gilt $H(p) = c|\vec{p}| = cp$ folgt:

$$\frac{1}{\lambda^3} = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta cp} = \frac{4\pi}{h^3} \int dp p^2 e^{-\beta cp} = \frac{4\pi}{(\beta ch)^3} \underbrace{\int_0^\infty d^2 x x^2 e^{-x}}_{=2! (\rightarrow \text{siehe Gammafunktion})} \quad (2)$$

$$= \frac{8\pi}{(\beta ch)^3} \quad (3)$$

Also sehen wir:

$$\lambda \sim \beta ch = \frac{ch}{k_B T} \quad (4)$$

- (e) *Geben Sie den Ausdruck für die Suszeptibilität der nichtwechselwirkenden Spins $S_i = \pm 1$ in Abhängigkeit von der Temperatur an.*

Antwort: Siehe Curie-Gesetz im Skript (Kapitel 4.2.1) oder Aufgabe 3:

$$\chi(T) = \frac{\mu^2 N}{k_B T}$$

- (f) *Geben Sie die korrekten Vorzeichen für die Arbeitsänderung an:*

$$\delta W = \pm pdV \pm \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} \pm \mu dN.$$

Antwort:

$$\delta W = -pdV + \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} + \mu dN.$$

- (g) *Wie lautet die Beziehung zwischen der kanonische Zustandsumme $Z(N)$ eines idealen Gases von N Teilchen und der Zustandsumme $Z(1)$ eines Teilchens?*

Antwort:

$$Z(N) = \frac{[Z(1)]^N}{N!}$$

Siehe Kapitel 5.1.1 im Script.

Im Zustandsintegral wird über alle möglichen Konfigurationen des N -Teilchensystems integriert. Für ununterscheidbare Teilchen hat man dabei allerdings jeden Phasenraumpunkt $N!$ mal zu viel gezählt, denn $N!$ ist ja gerade die Anzahl der Permutationen der N Teilchen – diese Permutationen gebem wegen Ununterscheidbarkeit alle den gleichen mikroskopischen Zustand und dürfen deshalb nur einmal gezählt werden.

(h) *Maxwell-Relationen: Zeigen Sie, dass*

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$$

gilt. Geben Sie eine andere Maxwell-Beziehung an.

Antwort:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}$$

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = -\frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T} = -\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = -\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T$$

(i) *Wie lautet die Definition des mikrokanonischen Ensembles?*

Antwort: Eine Menge abgeschlossener Systeme mit gegebener Teilchenzahl N , gegebenem Volumen V und gegebener Innerer Energie E .

Geben Sie einen allgemeinen Ausdruck für die Entropie des mikrokanonischen Ensembles an.

Antwort:

$$S = k_B \log \mathcal{N}(E)$$

wobei $\mathcal{N}(E)$ die Anzahl der möglichen Realisierungen des Systems bei der Energie E ist (also gerade der Entartungsgrad bei der Energie E). Dies liegt daran, dass das System dann gerade $\mathcal{N}(E)$ mögliche und gleichwahrscheinliche Zustände besitzt, wodurch die Wahrscheinlichkeit, dass das System in einem Zustand ist gerade:

$$\rho_i = \frac{1}{\mathcal{N}(E)}$$

Damit folgt aus der mikroskopischen Definition von S :

$$S = -k_B \sum_i^{\mathcal{N}(E)} \rho_i \ln(\rho_i) = -k_B \sum_i^{\mathcal{N}(E)} \frac{1}{\mathcal{N}(E)} \ln\left(\frac{1}{\mathcal{N}(E)}\right) \quad (5)$$

$$= -k_B \ln\left(\frac{1}{\mathcal{N}(E)}\right) = k_B \ln(\mathcal{N}(E)) \quad (6)$$

(j) *Für welchen Fall sind die drei verschiedenen statistischen Ensembles (kanonisch, mikrokanonisch und großkanonisch) äquivalent?*

Antwort: Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$.

2. Ideales Gasgemisch:

(30 Punkte)

Betrachten Sie ein klassisches ideales Gas bestehend aus zwei verschiedenen Atomsorten in einem Volumen V . Es gibt N_A Teilchen mit Masse M_A sowie N_B Teilchen mit Masse M_B .

- (a) Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme.

$$Z = \frac{V^{N_A+N_B}}{\lambda_A^{3N_A} \lambda_B^{3N_B} N_A! N_B!},$$
$$\lambda_A = h \sqrt{\frac{\beta}{2\pi M_A}}, \quad \lambda_B = h \sqrt{\frac{\beta}{2\pi M_B}}.$$

- (b) Finden Sie die Zustandsgleichung $p = p(V, T, N_A, N_B)$.

$$p = \frac{N_A + N_B}{V} k_B T.$$

- (c) Sind die chemische Potentiale μ_A and μ_B gleich?

$$\mu_i = \left(\frac{\partial F}{\partial N_i} \right)_{T, V, N_{j \neq i}}$$
$$F = -N_A k_B T \left[1 + \log \left(\frac{V}{N_A \lambda_A^3} \right) \right] - N_B k_B T \left[1 + \log \left(\frac{V}{N_B \lambda_B^3} \right) \right]$$
$$\mu_A = -k_B T \log \left(\frac{V}{N_A \lambda_A^3} \right)$$
$$\mu_B = -k_B T \log \left(\frac{V}{N_B \lambda_B^3} \right) \neq \mu_A.$$

- (d) Berechnen Sie die Entropie des Gases.

$$S = N_A k_B \log \left(\frac{V}{N_A \lambda_A^3} \right) + N_B k_B \log \left(\frac{V}{N_B \lambda_B^3} \right) + \frac{5}{2} (N_A + N_B) k_B$$

- (e) Für $M_A = M_B = M$ vergleichen Sie die Entropie (d) mit der Entropie eines Ein-Komponenten Gases aus $N = N_A + N_B$ Teilchen und Masse M .

$$M_A = M_B = M \Rightarrow \lambda_A = \lambda_B = \lambda$$

$$S = N_A k_B \log \left(\frac{V}{N_A \lambda^3} \right) + N_B k_B \log \left(\frac{V}{N_B \lambda^3} \right) + \frac{5}{2} (N_A + N_B) k_B$$

Die Entropie eines Ein-Komponenten Gases aus $N = N_A + N_B$ Teilchen und Masse M ist:

$$S = N k_B \log \left(\frac{V}{N \lambda^3} \right) + \frac{5}{2} N k_B$$

Es folgt:

$$S - S_0 = k_B [(N_A + N_B) \log(N_A + N_B) - N_A \log(N_A) - N_B \log(N_B)].$$

Siehe Kapitel 5.1.2 “Binary classical ideal gas” im Skript:
<http://www.tkm.kit.edu/downloads/TheoryF2012.pdf>

3. Thermodynamik von N nichtwechselwirkenden Spins: (40 Punkte)

Betrachten Sie ein System aus N nicht miteinander wechselwirkenden Spins, die an ein äußeres Magnetfeld $\mathbf{B}$ koppeln:

$$H = -\mu \mathbf{B} \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i \quad \text{mit } s_i = \pm 1.$$

- (a) Bestimmen Sie die freie Energie $F(B, T)$, die Entropie $S(B, T)$ und die Magnetisierung $\mathbf{M} = \mu \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{s}_i \rangle$.

Siehe Kapitel 4.2.1 “Spin 1/2 particles ... (paramagnetism)” im Skript:
<http://www.tkm.kit.edu/downloads/TheoryF2012.pdf>

Kanonische Zustandssumme:

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} = \sum_{\alpha} \prod_{i=1}^N e^{-\beta \mu B s_i} = \prod_{i=1}^N \underbrace{\sum_{s_i=\pm 1} e^{-\beta \mu B s_i}}_{Z_1} = [2 \cosh(\beta \mu B)]^N.$$

Die freie Energie:

$$F \equiv -k_B T \ln Z = -k_B T N \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right) \right].$$

Die Entropie

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_B = k_B N \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right) \right] - N \frac{\mu B}{T} \tanh \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right).$$

Die Magnetisierung

$$M = - \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_T = \mu N \tanh \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right).$$

- (b) Offensichtlich hängt die Entropie nur vom Verhältnis von Magnetfeld und Temperatur ab, $S(B, T) = S(B/T)$. Skizzieren Sie $S(B/T)$.

Wir suchen die Grenzwerte. Definieren wir

$$x = \frac{\mu B}{k_B T}$$

und entwickeln um $x = 0$:

$$\begin{aligned} \cosh(x) &= 1 + \frac{x^2}{2} + \mathcal{O}(x^4), & \ln \left(1 + \frac{x^2}{2} \right) &= \frac{x^2}{2} + \mathcal{O}(x^4), \\ x \cdot \tanh(x) &= x^2 + \mathcal{O}(x^4). \end{aligned}$$

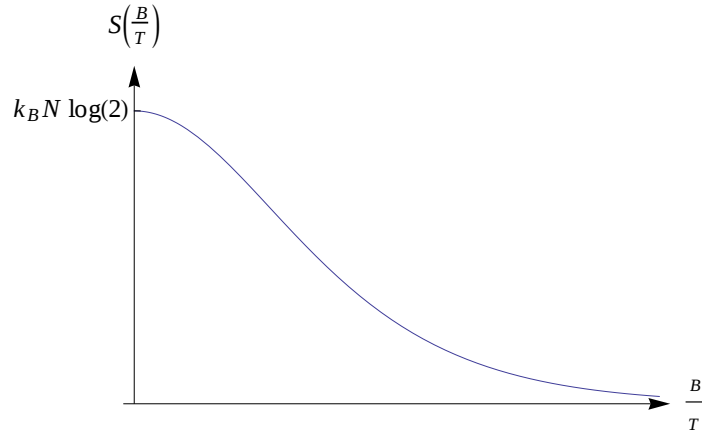


Abbildung 1: Entropie als Funktion von B/T

Damit ergibt sich

$$S(x \rightarrow 0) \approx k_B N \left[\ln(2) + \frac{x^2}{2} - x^2 \right] = k_B N \ln(2) - \frac{k_B N}{2} x^2.$$

Im Grenzwert $x \rightarrow \infty$ verwenden wir

$$\cosh(x) = \frac{e^x}{2}(1 + e^{-2x}) \quad \text{und} \quad \tanh(x) = 1 - \frac{2}{e^{2x} + 1} \approx 1 - 2e^{-2x}$$

und benutzen die Reihenentwicklung des Logarithmus:

$$\begin{aligned} S(x \rightarrow \infty) &\approx k_B N \left[x + \ln(1 + e^{-2x}) - x(1 - 2e^{-2x}) \right] \\ &\approx k_B N e^{-2x} + 2x k_B N e^{-2x} \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich die Skizze.

- (c) Bestimmen Sie die Näherungsausdrücke für M für kleines Magnetfeld $\mu B/k_B T \ll 1$ und großes Magnetfeld $\mu B/k_B T \gg 1$.

$$M(T, B) = \mu N \tanh\left(\frac{\mu B}{k_B T}\right)$$

Der Tangens Hyperbolicus kann für kleine Argumente $x \ll 1$ durch $\tanh(x) \approx x$ und für große Argumente $x \gg 1$ durch $\tanh(x) \approx 1$ genähert werden. Daraus folgt

- $\mu B/(k_B T) \ll 1$: $M \approx \frac{\mu^2 N B}{k_B T}$
- $\mu B/(k_B T) \gg 1$: $M \approx \mu N$

- (d) Berechnen Sie die Wärmekapazitäten bei konstantem Magnetfeld, bzw. konstanter Magnetisierung

$$C_B = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_B ; \quad C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M .$$

$$S(B/T) = k_B N \ln \left(2 \cosh \frac{\mu B}{k_B T} \right) - \frac{N \mu B}{T} \tanh \frac{\mu B}{k_B T}.$$

$$\begin{aligned}
C_B &= T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_B \\
&= T \left[-k_B N \frac{\mu B}{k_B T^2} \tanh \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right) + \frac{N \mu B}{T^2} \tanh \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right) - \frac{N \mu B}{T} \frac{1}{\cosh^2 \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right)} \left(-\frac{\mu B}{k_B T^2} \right) \right] \\
\Rightarrow C_B &= \frac{N \mu^2 B^2}{k_B T^2 \cosh^2 \left(\frac{\mu B}{k_B T} \right)}
\end{aligned}$$

Aus den Teilaufgabe (a) und (b) wissen wir, dass die Entropie nur vom Verhältnis B/T abhängt: $S(T, B) = S(B/T)$. Ebenfalls aus Teilaufgabe (a) ist bekannt, dass $M = M(B/T)$. Diese Abhängigkeit können wir invertieren und in die Entropie einsetzen, woraus folgt, dass C_M verschwindet.

$$S(B/T) \rightarrow S = S(M) \quad \Rightarrow \quad C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M = 0$$

- (e) Das Spinsystem werde nun bei einer Magnetfeldstärke $B_1 > 0$ durch Kopplung an ein Wärmebad auf die Temperatur $T_1 > 0$ gebracht und anschließend wärmeisoliert. Ändert man nun das Magnetfeld auf einen neuen Wert $B_2 > 0$, so verläuft dieser Prozess adiabatisch. Was folgt daraus für die Entropie? Was gilt also für die Temperatur T_2 , die das Spinsystem nach der Magnetfeldänderung besitzt? Wie muss B_2 gewählt werden, damit das Spinsystem abgekühlt wird, also $T_2 < T_1$ gilt.

$$\delta Q = T dS = 0 \quad \Rightarrow \quad dS = 0 \quad \text{im adiabatischen Prozess.}$$

Die Entropie ändert sich nicht. Da $S = S(B/T)$ folgt $B/T = \text{konst.}$ und damit

$$\frac{B_1}{T_1} = \frac{B_2}{T_2} \quad \Rightarrow \quad B_2 = \frac{T_2}{T_1} B_1$$

$$S = \text{const} \quad \Rightarrow \quad \frac{B_1}{T_1} = \frac{B_2}{T_2}$$