

Lectures:

- 16.11. Recapitulation. Canonical Ensemble. Example: Polymer
 18.11. Ideal Gas in the canonical ensemble. Energy fluctuations. Classical degrees of freedom: Virial and Equipartition Theorems.

Book:

Schwabl 2.4.-2.7

Additional reading (see homepage): *Times's arrow*

Excercises:

Please hand in until Mo 22.11.2021, 8:00 (10 points each):.

- 7a) The number of possibilities to choose $N-1$ indistinguishable elements out of $R+N-1$ objects is given by the binomial coefficient $\Omega = \frac{(R+N-1)!}{R!(N-1)!}$. Argue that this is also the number of possibilities to distribute R indistinguishable quanta over N distinguishable oscillators.
- b) Consider two parts 1 and 2 of a system with N oscillators each and a total of $R=R_1+R_2$ quanta. What is the number of possibilities $\Omega=\Omega_1\Omega_2$ to distribute the $R=R_1+R_2$ quanta as a function of N , R , and R_1 ? Approximate Ω with a Gaussian in the vicinity of equilibrium as a function of $r=R/2-R_1=R_2-R/2$. What is the fluctuation of the energy Δr (in units of $\hbar\omega$)? Plot Ω for $N=R=30$ as a function of R_1 .
- c) Calculate the entropy for each part $S_1(N,R_1)$ and $S_2(N,R_2)$ as well as the corresponding temperatures T_1 and T_2 (in units of $\hbar\omega$) assuming that Stirling's approximation $x! \approx \sqrt{2\pi x} e^{-x} x^x$ holds. Check the statement that small shifts of energy δE change the number of states $\Omega=\Omega_1\Omega_2$ with $\exp(\beta_1-\beta_2)\delta E$.
- 8) Consider N distinguishable independent dipoles in a magnetic field with energy $\varepsilon = -\vec{d} \cdot \vec{B}$ each.
- a) Use the canonical ensemble to calculate the partition function assuming that the dipoles can rotate in two or three dimensions, respectively. Note, that the partition function is a function of B/T . What does this imply for the free energy?
- b) Determine expressions for the energy, the specific heat, and the magnetization. Plot the magnetization as a function of B/T for the case of two and three dimensions, respectively. What is the difference?
- c) Determine the magnetic susceptibility in the limit of small fields to determine the so-called Curie constant. In the lecture we considered a simplified polymer model with segments only pointing left or right. How can those be generalized to determine the susceptibility for a quantized dipole of a spin-1/2 particle? Compare the Curie constants of the quantized model with the two and three dimensional cases. If they are not the same, try to explain the difference on physical grounds.

Übungen (deutsche Version)

- 7a) Die Anzahl der Möglichkeiten $N-1$ ununterscheidbare Elemente aus $R+N-1$ Objekten auszuwählen ist durch den Binomialkoeffizienten $\Omega = \frac{(R+N-1)!}{R!(N-1)!}$ gegeben. Begründe, dass dies auch genau der Anzahl von Möglichkeiten entspricht, R ununterscheidbare Quanten auf N unterscheidbare Oszillatoren zu verteilen.
- b) Betrachte zwei Teilsysteme 1 und 2 mit jeweils N Oszillatoren und insgesamt $R=R_1+R_2$ Quanten. Was ist die Anzahl der Möglichkeiten $\Omega=\Omega_1\Omega_2$ für eine Verteilung der $R=R_1+R_2$ Quanten als Funktion von N , R und R_1 ? Nähere Ω mit einer Gaussfunktion in der Nähe der Gleichgewichtsverteilung als Funktion von $r=R/2-R_1=R_2-R/2$. Was ist die Schwankungsbreite Δr der Energie (in Einheiten von $\hbar\omega$)? Skizziere Ω für $N=R=30$ als Funktion von R_1 .
- c) Berechne die Entropien der Teilsysteme $S_1(N,R_1)$ und $S_2(N,R_2)$ und die entsprechenden Temperaturen T_1 und T_2 (in Einheiten von $\hbar\omega$) unter der Annahme, dass die Stirlingssche Formel $x! \approx \sqrt{2\pi x} e^{-x} x^x$ gilt. Überprüfe die Aussage, dass sich mit einer kleinen Energieverschiebung δE die Anzahl der Zustände $\Omega=\Omega_1\Omega_2$ mit $\exp(\beta_1-\beta_2)\delta E$ ändert.
- 8) Betrachte N unterscheidbare unabhängige Dipole in einem Magnetfeld jeweils mit der Energie $\varepsilon = -\vec{d} \cdot \vec{B}$.
- a) Wende das kanonische Ensemble an, um das Zustandsintegral zu berechnen jeweils unter der Annahme, dass sich die Dipole in zwei oder in drei Dimensionen drehen können. Beachte, dass das Zustandsintegral nur eine Funktion des Quotienten B/T ist. Was bedeutet das für die freie Energie?
- b) Bestimme Ausdrücke für die Energie, die spezifische Wärme und die Magnetisierung. Skizziere die Magnetisierung als Funktion von B/T im zwei und im drei dimensional Fall. Was ist der Unterschied?
- c) Bestimme die Suszeptibilität im Grenzwert kleiner Feldstärken um eine Curie-Konstante für das „Curie Gesetz“ zu erhalten. In der Vorlesung wurde ein vereinfachtes Polymermodell betrachtet, in dem die Segmente nur nach links/rechts zeigen können. Wie kann man die Resultate vom vereinfachten Polymermodell nutzen um die Suszeptibilität für einen entsprechenden quantisierten Dipol eines Spin-1/2 Teilchens zu bestimmen? Vergleiche die Curie-Konstanten im quantisierten Modell und im zwei und drei dimensional Fall. Falls sie verschieden sind, versuche den Unterschied physikalisch zu erklären.

Verständnisfragen

- 34.) Beschreibe das Konzept des Kanonischen Ensembles und leite es mit Hilfe des Mikrokanonischen Ensembles her. Was ist die Boltzmann Verteilung?
- 35.) Was ist die kanonische Zustandssumme? Leite den Erwartungswert der Energie als Ausdruck der Zustandssumme her.
- 36.) Wie ist die Freie Energie definiert? Wie können Energie, Entropie sowie generalisierte Kräfte (Druck, etc.) als Funktion der Freien Energie berechnet werden?
- 37.) Vergleiche die Konzepte des Kanonischen und des Mikrokanonischen Ensembles in einer Liste: Was ist die jeweilige physikalische Situation? Was ist jeweils die Zustandssumme und das zentrale thermodynamische Potential? Wie werden thermodynamische Größen (gen. Kräfte, Druck, Temperatur, Energie und Entropie) bestimmt? Was sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten?
- 38.) Betrachte ein vereinfachtes quantisiertes Modell für ein „Polymer“, wobei die einzelnen Polymerglieder der Länge d nur nach links oder rechts zeigen können. Berechne den Erwartungswert der Länge L mit Hilfe des Kanonischen Ensembles als Funktion der Kraft.
- 39.) Was versteht man unter einer Einteilchenzustandssumme? Wann sind Teilsysteme unabhängig? Wie vereinfacht dies die Berechnung der Zustandssumme?
- 40.) Wende die Methoden des Kanonischen Ensembles auf das Ideale Klassische Gas an. Rechne die Erwartungswerte für den Druck, die Energie und die Entropie aus.
- 41.) Was ist die Mischentropie für ideale Gase? Was ist das Gibbsche Paradoxon? Wie wird in der Berechnung der Zustandssumme berücksichtigt, dass Teilchen ununterscheidbar sind?
- 42.) Zeige allgemein, dass Energieschwankungen im kanonischen Ensemble von der spezifischen Wärme und der Temperatur bestimmt werden können.
- 43.) Wie verhalten sich die absoluten und relativen Energiefluktuationen als Funktion von N in einem idealen Gas?
- 44.) Argumentiere, dass im kanonischen Ensemble die Änderung des Erwartungswertes der Energie dE in Wärme und Arbeit als Funktion von Änderungen der Wahrscheinlichkeiten und der Energiewerte aufgeteilt werden kann.
- 45.) Was ist der Virialsatz? Leite ihn her!
- 46.) Was ist das Äquipartitionstheorem? Leite es her!

English translation:

- 7a) The number of possibilities to choose $N-1$ indistinguishable elements out of $R+N-1$ objects is given by the binomial coefficient $\Omega = \frac{(R+N-1)!}{R!(N-1)!}$. Argue that this is also the number of possibilities to distribute R indistinguishable quanta over N distinguishable oscillators.
- b) Consider two parts 1 and 2 of a system with N oscillators each and a total of $R=R_1+R_2$ quanta. What is the number of possibilities $\Omega=\Omega_1\Omega_2$ to distribute the $R=R_1+R_2$ quanta as a function of N , R , and R_1 ? Approximate Ω with a Gaussian in the vicinity of equilibrium as a function of $r=R/2-R_1=R_2-R/2$. What is the fluctuation of the energy Δr (in units of $\hbar\omega$)? Plot Ω for $N=R=30$ as a function of R_1 .
- c) Calculate the entropy for each part $S_1(N,R_1)$ and $S_2(N,R_2)$ as well as the corresponding temperatures T_1 and T_2 (in units of $\hbar\omega$) assuming that Stirling's approximation $x! \approx \sqrt{2\pi x} e^{-x} x^x$ holds. Check the statement that small shifts of energy δE change the number of states $\Omega=\Omega_1\Omega_2$ with $\exp(\beta_1-\beta_2)\delta E$.
- 8) Consider N distinguishable independent dipoles in a magnetic field with energy $\varepsilon = -\vec{d} \cdot \vec{B}$ each.
- a) Use the canonical ensemble to calculate the partition function assuming that the dipoles can rotate in two or three dimensions, respectively. Note, that the partition function is a function of B/T . What does this imply for the free energy?
- b) Determine expressions for the energy, the specific heat, and the magnetization. Plot the magnetization as a function of B/T for the case of two and three dimensions, respectively. What is the difference?
- c) Determine the magnetic susceptibility in the limit of small fields to determine the so-called Curie constant. In the lecture we considered a simplified polymer model with segments only pointing left or right. How can those be generalized to determine the susceptibility for a quantized dipole of a spin-1/2 particle? Compare the Curie constants of the quantized model with the two and three dimensional cases. If they are not the same, try to explain the difference on physical grounds.