Statistische Physik und Thermodynamik

WS 2010/2011, Studienziel Bachelor, TP-4

Dozent: F. Marquardt   Übungen: B. Kubala

Übungsblatt 3   Abgabe: 11.11. 2010

Präsenzaufgaben

Aufgabe 8 : Extrema unter Nebenbedingungen

a) Geometrische Interpretation des Lagrangeschen Multiplikators:

Skizzieren Sie Höhenlinien ($g(x, y)$ =konstant) einer zweidimensionalen Funktion $g(x, y)$ in der Nähe eines lokalen Maximums der Funktion. Skizzieren Sie den Gradienten $\vec{\nabla} g$ an verschiedenen Punkten (x, y).
Zeichnen Sie in dasselbe Koordinatensystem die Kurve, die durch die Gleichung $f(x, y) = 0$ definiert ist, und markieren Sie den Punkt (x_m, y_m) auf dieser Kurve, an dem g am größten ist. Skizzieren Sie $\vec{\nabla} f$. Wie verläuft die durch $f(x, y) = 0$ definierte Kurve bezüglich der Höhenlinien von g am Punkt (x_m, y_m)?
Zeigen Sie, das aus diesen geometrischen Überlegungen folgt, dass am Punkt (x_m, y_m) die Beziehung $\vec{\nabla} g = \lambda \vec{\nabla} f$ gilt, wobei die Konstante λ Lagrangescher Multiplikatoren genannt wird.

b) Interpretation in höherer Dimension:

Betrachten Sie die dreidimensionale Funktion $h(x, y, \lambda) = g(x, y) - \lambda f(x, y)$ und geben Sie die notwendige Bedingung für ein lokales Extremum von h an der Stelle $(x_m,\ y_m,\ \lambda_m)$ an. Welchen Wert hat $f(x_m, y_m)$?
Wenn wir uns in beliebige Richtung von einem Maximum (Minimum) einer Funktion wegbewegen, wird die Funktion kleiner (größer). Erklären Sie damit, wieso (x_m, y_m) ein Extremum von $g(x, y)$ unter der Nebenbedingung $f(x, y) = 0$ ist.

c) Lagrangescher Multiplikator aus implizit definierter Funktion:

Wir wollen wiederum ein Extremum von $g(x, y)$ unter der Nebenbedingung $f(x, y) = 0$ finden. Die Bedingung $f(x, y) = 0$ definiert implizit eine Funktion $y_f(x)$, für die $f(x, y_f(x)) \equiv 0$ gilt. Leiten Sie $f(x, y_f(x))$ nach x ab.
Wir finden jetzt das Extremum von $g(x, y)$ unter der Nebenbedingung $f(x, y) = 0$, indem wir $y = y_f(x)$ in g einsetzen. Finden Sie die Bedingung für ein Extremum und benutzen Sie die oben berechnete Ableitung, um mit der Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren zu vergleichen.

d) Beispiel:

Der Umfang eines Rechtecks betrage $4a$. Benutzen Sie die Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren, um diejenigen Seitenlängen x, y des Rechtecks zu finden, für die der Flächeninhalt maximal wird.

Aufgabe 9 : Paramagnet

Betrachten Sie einen Spin $S \geq \frac{1}{2}\hbar,\ 2S/\hbar \in \mathbb{N}$. In einem Magnetfeld $B = B_z$ in z-Richtung kann die z-Komponente des Spins die $2(S/\hbar) + 1$ Werte $-S, (-S + 1), \dots, S$ annehmen. Die Energie des Spins im Magnetfeld ist dann $E_{\sigma_i} = -g\mu_B B_z(S_z/\hbar) =: -\sigma_i \Delta$ mit $\sigma_i = -S/\hbar,\ -(S/\hbar) + 1, \dots, S/\hbar$.
a) Bestimmen Sie die Zustandssumme Z.
b) Finden Sie die Magnetisierung, bzw. $\langle (S_z/\hbar) \rangle$ und skizzieren Sie $\langle S_z/\hbar \rangle$ als Funktion der Temperatur für verschiedene Werte von S. Bestimmen Sie dazu den Grenzwert für $T = 0$ und vergleichen Sie mit dem 2-Niveausystem, um das qualitative Tieftemperaturverhalten zu verstehen.
Für große Temperaturen kann man eine einfache Abschätzung finden, indem man die Besetzungwahrscheinlichkeiten der Zustände, $P_{\sigma_i} = P(E_{\sigma_i})$, im Grenzfall großer Temperatur betrachtet und die Summe im Erwartungswert für große Werte von $|\sigma_i|$ abschätzt.

Wir wollen im folgenden den Grenzfall großer Werte S des Spins betrachten.
c) Finden Sie zunächst mit Ihren Ergebnissen aus b) heraus, wie Sie die Magnetisierung auftragen müssen, um eine 'universelle' Kurve für große S zu finden.
d) Wir vergleichen nun mit einem klassischen Modell des Spins. Dazu betrachten wir den Spin als klassischen Vektor der Länge S der in eine beliebige Richtung zeigen kann (Die Spitze des Vektors liegt also auf einer Kugel des Radius S.). Die Energie im Magnetfeld ist wieder durch die z-Komponente des Spinvektors bestimmt. Berechnen Sie wiederum den Erwartungswert $\langle (S_z/\hbar) \rangle = \langle (S/\hbar) \cos\theta \rangle$ und vergleichen Sie mit b) und c).

Hausaufgaben

Hausaufgabe 6 : Paramagnet *(8 Punkte)*

Wir betrachten wie in Aufgabe 9 einen Spin S im Magnetfeld.
a) Bestimmen Sie die spezifische Wärme C_V im quantenmechanischen und im klassischen Fall.
b) Betrachten Sie die Grenzfälle $T = 0$ sowie $T \to \infty$ und skizzieren Sie die Temperaturabhängigkeit von C_V. Das quantenmechanische Spinsystem ähnelt im Fall $S/\hbar >> 1$ einem harmonischen Oszillator. In welchem Temperaturbereich findet man ähnliche Ergebnisse wie im klassischen Limes eines harmonischen Oszillators? Bestimmen Sie C_V in diesem Bereich und markieren Sie den entsprechenden Bereich in Ihrer Skizze.
c) Finden Sie wie in Aufgabe 9 c) eine günstige Auftragung, um eine 'universelle' Kurve für große S zu finden.

Hausaufgabe 7 : Starrer Rotor *(4 Punkte)*

Die Rotationsfreiheitsgrade eines zweiatomigen Moleküls werden durch einen sogenannten starren Rotor mit Trägheitsmoment I beschrieben. Die quantenmechanischen Energieniveaus sind dann

$$E_j = \frac{\hbar^2}{2I} j(j+1)\ , \quad j = 0,\, 1,\, 2, \dots\ ,$$

und jedes Niveau ist $(2j + 1)$-fach entartet.
Bestimmen Sie die Zustandssumme Z. Für hohe Temperatur kann man die Summe durch ein Integral approximieren. Substituieren Sie $x = j(j + 1)$ und finden Sie Hochtemperaturausdrücke für Energie und C_V.