

Übungen zur Computational Physics

Aufgabe 17 — Fluktuationen

Der Makrozustand eines klassischen Systems im thermodynamischen Gleichgewicht wird durch die Wahrscheinlichkeiten

$$p_k = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_k}$$

beschrieben, mit der die Mikrozustände $k = 1, \dots, M$ vorliegen. E_k sei die Energie des Mikrozustands k .

- Geben Sie die Zustandssumme Z an!
- Wie berechnet sich der Erwartungswert der Energie $E = \langle E \rangle$?
- Berechnen Sie jetzt die Wärmekapazität

$$C = \frac{\partial E}{\partial T},$$

und zeigen Sie, dass sich die Energiefluktuationen folgendermaßen durch C ausdrücken lassen:

$$\Delta E = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = k_B T^2 C !$$

Aufgabe 18 — Kalorische Zustandsgleichung des eindimensionalen Ising-Modells

- Wie kann man den Mittelwert der Gesamtenergie $\langle E \rangle$ aus der Zustandssumme ableiten?
- Berechnen Sie $\langle E \rangle$ und die Wärmekapazität für das eindimensionale Ising-Modell für $B = 0$!
- Berechnen Sie die freie Energie $F = -k_B T \ln Z$ für $B = 0$!
- Bestimmen Sie über $F = \langle E \rangle - TS$ die Entropie S !
- Zeigen Sie, dass der dritte Hauptsatz ($S \rightarrow 0$ für $T \rightarrow 0$) erfüllt ist! Zeigen Sie, dass für $T \rightarrow \infty$ die Entropie durch k_B mal dem Logarithmus der Gesamtzahl aller Mikrozustände gegeben ist!