

# Statistische Physik

## Hausübungen

Leibniz Universität Hannover, Wintersemester 2018/19

Vorlesung: PROF. DR. O. LECHTENFELD

Hausübungsaufgaben: DR. TILL BARGHEER

Computerübungen: GLEB ZHILIN

### Inhaltsverzeichnis

1 Blatt 1	3
2 Blatt 2	5
3 Blatt 3	7
4 Blatt 4 (Computerübung)	9
5 Blatt 5	11
6 Blatt 6	13
7 Blatt 7 (Computerübung)	15
8 Blatt 8	17
9 Blatt 9	19
10 Blatt 10 (Computerübung)	21
11 Blatt 11	23
12 Blatt 12	25
13 Zusatzübung	27



**[H1] Gesetz großer Zahlen**

**(6 Punkte)**

Eine Münze werde  $N$  mal geworfen. Für große  $N$  erwartet man, dass Kopf und Zahl ungefähr gleich oft oben liegen. Dies wollen wir präzisieren.

- (a) Schätzen Sie für große  $N$  die Wahrscheinlichkeit ab, dass die Münze genau  $N/2$  mal Kopf zeigt.
- (b) Zeigen Sie für große  $N$ , dass die Wahrscheinlichkeit, zwischen  $N/2 - \sqrt{N}$  und  $N/2 + \sqrt{N}$  mal Kopf zu erhalten, unabhängig von  $N$  ist.

*Hinweis:* Benutzen Sie die Stirling-Formel sowie ggf. weitere Resultate aus der Vorlesung.

**[H2] Ideales Gas**

**(6 Punkte)**

Betrachten Sie  $N$  unterscheidbare freie Teilchen, die jeweils durch drei ganzzahlige Impulskomponenten  $(k_1, k_2, k_3) \in \mathbb{Z}^3$  beschrieben sind, und deren kinetische Energie  $U$  proportional zu  $\sum_i k_i^2$  ist.

- (a) Zeigen Sie für große  $U$  und  $N$ , dass die Zahl möglicher Zustände mit Gesamtenergie zwischen  $U$  und  $U + \epsilon$  mit  $\epsilon \ll U$  die Form

$$g(N, U) \simeq \epsilon f(N) U^{3N/2} \quad (1)$$

hat, wobei  $f(N)$  eine (unbestimmte) Funktion von  $N$  ist.

*Hinweis:* Betrachten Sie zuerst die Zahl möglicher Zustände mit Energie *kleiner* als  $U$ , und leiten Sie diese nach  $U$  ab. Das Volumen einer  $n$ -dimensionalen Kugel mit Radius  $r$  ist proportional zu  $r^n$ .

- (b) Betrachten Sie zwei solcher Systeme, mit Teilchenzahlen  $N_1$  und  $N_2$ , die in thermischem Kontakt stehen, d. h. alle Zustände mit Gesamtenergie zwischen  $U$  und  $U + \epsilon$  sind gleich wahrscheinlich. Welches ist der wahrscheinlichste Wert für die Energie  $U_1$  des Systems mit  $N_1$  Teilchen?

*Hinweis:* Die Frage kann beantwortet werden, ohne die Funktion  $f(N)$  zu kennen.



[H3] Paramagnetismus

(6 Punkte)

Betrachten Sie das in der Vorlesung diskutierte Spinsystem. Verwenden Sie die Gauß-Näherung für die Multiplizitätsfunktion:

$$g(N, s) \simeq g(N, 0) e^{-2s^2/N}. \quad (1)$$

In der Gegenwart eines externen magnetischen Feldes  $B$  beträgt die Gesamtenergie

$$U = -2smB, \quad (2)$$

wobei  $m$  das (konstante) magnetische Moment eines einzelnen Spins ist. Die partielle Magnetisierung ist die Größe

$$\mu = 2s/N. \quad (3)$$

- (a) Zeigen Sie, dass für die Temperatur dieses Systems (in natürlichen Einheiten) gilt

$$\tau = -\frac{m^2 B^2 N}{U}. \quad (4)$$

- (b) Welches ist der wahrscheinlichste Wert für  $\mu$ , wenn sich das System im thermischen Gleichgewicht mit Temperatur  $\tau$  befindet? Erklären Sie, warum die Antwort für  $\tau < mB$  ungültig ist.
- (c) In der vorigen Hausübung zeigten Sie, dass bei gegebener Energie  $U$  die Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Spin im Zustand „up“ zu finden,

$$p(\uparrow) \simeq \frac{1}{1 + e^{2U/(mBN)}} \quad (5)$$

beträgt. Schreiben Sie diese Wahrscheinlichkeit als eine Funktion der Temperatur  $\tau$  des Gesamtsystems anstelle der Energie  $U$ . Zeigen Sie, dass

$$\frac{p(\downarrow)}{p(\uparrow)} = e^{-\delta U/\tau} \quad (6)$$

gilt, wobei  $\delta U$  die Änderung der Gesamtenergie unter Wechsel des einzelnen Spinzustands von „up“ zu „down“ bezeichnet. Dieser Quotient ist der *Boltzmann-Faktor* für einen Spin, welcher sich in thermischem Kontakt mit dem großen *Reservoir* aller anderen Spins befindet.

- (d) Berechnen Sie den mittleren Energiebeitrag  $\bar{u}$  eines einzelnen Spins als Funktion der Temperatur  $\tau$ . Spin „up“ trägt  $-mB$ , spin „down“ trägt  $+mB$  zur Gesamtenergie bei. Zeigen Sie, dass

$$\bar{u} = -mB \tanh(mB/\tau). \quad (7)$$

**Bitte wenden**

**[H4] Gleichförmige Quantenzustände****(6 Punkte)**

Wir erinnern: Die von-Neumann-Entropie eines quantenmechanischen Ensembles mit Dichteoperator  $\rho$  ist

$$S(\rho) = -\operatorname{tr}(\rho \ln \rho). \quad (8)$$

Betrachten Sie einen Hamilton-Operator  $H$  mit diskretem Spektrum. Es sei  $P_i$  der Projektionsoperator auf den  $i$ -ten Eigenraum mit Energie-Eigenwert  $U_i \in \mathbb{R}$ , d. h.

$$H = \sum_i U_i P_i. \quad (9)$$

Dies ist die *Spektralzerlegung* von  $H$ , die  $P_i$  sind *Spektralprojektoren*. Die Spektralzerlegung ist eindeutig, weil alle Eigenwerte  $U_i$  verschieden sind, und weil die  $P_i$  einen vollständigen Satz orthogonaler Projektoren bilden, also  $P_i P_j = 0$  für  $i \neq j$ , und  $\sum_i P_i = \mathbf{1}$ . Die Multiplizität des Eigenwerts  $U_i$  (also die Dimension des zugehörigen Eigenraums) ist  $\operatorname{tr} P_i$ .

- (a) Welcher Zustand  $\rho$  maximiert die Entropie unter der Bedingung, dass eine Energiemessung mit Sicherheit einen bestimmten Wert  $U_i$  ergibt? Wie hoch ist die Entropie in diesem Fall? Skizzieren Sie einen Beweis Ihrer Antwort.

*Hinweis:* Zeigen Sie erst, dass  $\operatorname{tr}(\rho P_i^\perp) = 0$  ist, wobei  $P_i^\perp$  auf den Null-Eigenraum zu  $P_i$  projiziert. Schreiben Sie dann die Spur als eine Summe positiver Zahlen.

- (b) Betrachten Sie  $N$  unabhängige Kopien des Systems, so dass der Hamiltonoperator  $H$  für das Gesamtsystem die Summe der Hamiltonoperatoren  $H_k$ ,  $k = 1, \dots, N$  der Einzelsysteme ist. Drücken Sie die Spektralzerlegung von  $H$  durch die Spektralzerlegung eines der Einzelsysteme aus.

*Hinweis:* Schreiben Sie zuerst  $H$  als Linearkombination des vollständigen Systems orthogonaler Projektoren  $\{P_{i_1} \otimes P_{i_2} \otimes \dots \otimes P_{i_N}\}_{i_1, \dots, i_N=1}^\infty$ .

**[H5] Gleichgewichtszustand und maximale Entropie**

**(6 Punkte)**

- (a)  $A$  und  $B$  seien komplexe Matrizen. Zeigen Sie, dass

$$\frac{\partial}{\partial A_{ij}} \operatorname{tr}(AB) = B_{ji}. \quad (1)$$

- (b) Sei  $\rho$  ein Dichteoperator mit  $\det \rho \neq 0$ . Man kann zeigen, dass (*dies zu zeigen ist nicht Teil der Aufgabe*)

$$\operatorname{tr} \left( \rho \frac{\partial \ln \rho}{\partial \rho_{ij}} \right) = \delta_{ij}. \quad (2)$$

Gesucht ist der Zustand  $\rho$ , welcher bei vorgegebener Energie  $U = \operatorname{tr}(\rho H)$  die von-Neumann-Entropie  $S(\rho) = -\operatorname{tr}(\rho \ln \rho)$  maximiert. Benutzen Sie die Methode der Variationsrechnung, mit Lagrange-Multiplikatoren für die Bedingungen  $\operatorname{tr} \rho = 1$  und  $\operatorname{tr}(\rho H) = U$ . Zeigen Sie, dass die Entropie ein lokales Extremum im Quantenzustand

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\operatorname{tr} e^{-\beta H}} \quad (3)$$

hat, wobei  $\beta \in \mathbb{R}$  einer der Lagrange-Multiplikatoren ist. Geben Sie die *implizite* Abhängigkeit von  $U$  an. Das heißt, schreiben Sie eine Gleichung, die  $\beta$  und  $U$  in Beziehung setzt, ohne die Gleichung nach  $\beta$  zu lösen.

- (c) Wenn sich ein System mit Hamiltonoperator  $H$  im thermischen Gleichgewicht mit einem ausreichend großen Reservoir bei Temperatur  $\tau$  befindet, dann ist sein Zustand genau durch obige Dichtematrix (3) gegeben, mit

$$\beta = 1/\tau. \quad (4)$$

Die Zustandssumme ist darum  $Z = \operatorname{tr} e^{-\beta H}$ , und die freie Energie ist

$$F = -\tau \ln Z. \quad (5)$$

Zeigen Sie, dass

$$\frac{dF}{d\tau} = -S \quad (6)$$

gilt, wobei  $S$  die von-Neumann-Entropie des Zustands (3) ist.

*Hinweis:* Berechnen Sie beide Seiten unabhängig voneinander.

**Bitte wenden**

**[H6] Rotierendes starres zweiatomiges Molekül****(6 Punkte)**

Moleküle können rotieren, und die Rotation trägt zur kinetischen Energie bei. Die Rotationsbewegung ist quantisiert, und die kinetischen Energie-Eigenwerte für ein zweiatomiges Molekül sind von der Form

$$\epsilon(j) = j(j+1)\epsilon_0, \quad (7)$$

wobei  $j = 0, 1, 2, \dots$  und  $\epsilon_0 = \hbar^2/(2I)$  mit dem Trägheitsmoment  $I$ . Die Multiplizitäten der Eigenwerte sind

$$g(j) = 2j + 1. \quad (8)$$

Wir ignorieren die Schwerpunktsbewegung sowie mögliche Vibrationen des Moleküls.

- (a) Geben Sie die Zustandssumme  $Z(\tau)$  für ein einzelnes Molekül an.
- (b) Finden Sie eine Näherung für  $Z(\tau)$  bei  $\tau \gg \epsilon_0$ , indem Sie die Summe in ein Integral überführen.
- (c) Finden Sie eine Näherung für  $Z(\tau)$  bei  $\tau \ll \epsilon_0$ , indem Sie die Summe auf die ersten beiden Terme beschränken.
- (d) Finden Sie Ausdrücke für die Energie  $U$  und die Wärmekapazität  $C$  als Funktionen von  $\tau$  für die beiden Fälle (b) und (c). Zeigen Sie, dass der Beitrag der Rotation zur Wärmekapazität eines zweiatomigen Moleküls für  $\tau \gg \epsilon_0$  zu 1 tendiert.

Firstly, a few words about this exercise course. You can form groups up to 3 persons. The solutions should be uploaded to StudIP in form of a PDF file or a Mathematica notebook into the corresponding folder. I will look at the latest version uploaded before 12:00 on the submission day. The solutions should contain the code, its output and comments describing what you do and why.

The preferred program is Mathematica. You can use other tools and languages (e.g. Python), but support is not guaranteed.

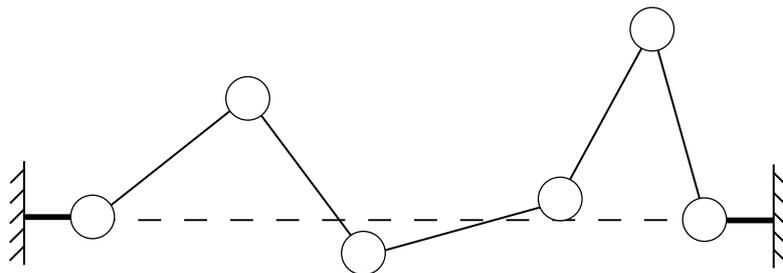
There is no strict grading system as these exercises are not about following a recipe. There are several ways to approach the problem, and many ways to shape your approach into a code. The exercises are not extensive: if you know what you're doing, you can solve them in a few lines.

If you have questions about this exercise, or if you're stuck, you can contact me via [zhilin@math.uni-hannover.de](mailto:zhilin@math.uni-hannover.de).

[H7] Thermodynamics of a chain

(12 points)

Imagine a chain (see picture) built from  $N$  absolutely rigid rods of equal length  $\ell$  (in our units  $\ell = 1$ ) which connect at freely moving joints. The endpoints of the chain are held in place, separated by distance  $L$ . Suppose that the chain is confined to a plane (lives in 2d space), and is in thermal equilibrium with temperature  $\tau$ . **Compute** the force that the chain exerts at the endpoints (also note its direction). Plot this force as a function of length  $L$  in the cases when  $N = 3, 5, 8$ .



A chain with  $N = 5$  links. Endpoints are fixed, inner joints can move freely (save for constraints from rigid rods). The rods are allowed to overlap, the joints have zero size. The chain is thermalized, you can imagine that it twitches chaotically under thermal fluctuations.

*Hint 1* You can compute the force in the same manner you derive the pressure of a gas from its partition function. You will find that the temperature  $\tau$  will enter the formula in a very simple way, so for numerical computations you can set  $\tau = 1$ .

Please turn

*Hint 2* One way to do the computation (other approaches are very much welcome) is to think of the chain as of a result of a random walk with  $N$  steps. In such a walk each step has fixed length  $\ell = 1$  and random direction, and for a moment we let one of the chain's endpoints move freely. The position of this free endpoint is random, described by some probability density  $p_N(x, y)$ . Careful thought reveals that the partition function  $Z_N(L, \tau)$  is given, up to an irrelevant factor, by  $p_N(L, 0)$ . If you use this approach, explain why the last statement is correct.

*Hint 3* If you choose to simulate a random walk, note that  $p_N(x, y)$  is rotationally symmetric (no preferred direction). So instead of counting walks that end in the vicinity of  $(x, y) = (L, 0)$  you can use the vicinity of the whole  $x^2 + y^2 = L^2$  ring.

*Remark* The pressure of a gas can be deduced from the amount of work the gas does when it expands. In our case expansion means increase of the distance  $L$  between the endpoints of the chain.

[H8] Gibbssches Paradoxon

(5 Punkte)

Die kanonische Zustandssumme eines freien Teilchens der Masse  $M$  bei festem Volumen  $V$  ist

$$Z_1 = n_Q(\tau)V, \quad (1)$$

mit

$$n_Q(\tau) = \left( \frac{M\tau}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (2)$$

- (a) Betrachten Sie  $N$  unabhängige aber *unterscheidbare* Teilchen obiger Art. Zeigen Sie, dass für die Entropie  $\sigma(N, V)$  gilt

$$\sigma(N, V) = N \ln(n_Q(\tau)V) + \frac{3}{2}N. \quad (3)$$

- (b) Gegeben seien zwei identische Behältnisse mit Volumina  $V$  bei Temperatur  $\tau$ . Jedes der Behältnisse enthalte  $N$  unterscheidbare Teilchen. Berechnen Sie die Gesamtentropie des Systems. Zeigen Sie, dass die Gesamtentropie von der Entropie eines einzelnen Behälters mit Volumen  $2V$  und  $2N$  Teilchen bei der gleichen Temperatur um

$$\Delta\sigma = -2N \ln 2 \quad (4)$$

abweicht. Dies bedeutet, dass die Entropie willkürlich um einen endlichen Beitrag erhöht oder gesenkt werden kann, indem man einen Gasbehälter durch Einsetzen einer Wand in zwei getrennte Bereiche teilt oder eine solche Wand entfernt. Dieses Verhalten widerspricht den Grundsätzen der Thermodynamik.

- (c) Führen Sie die gleiche Rechnung für den Fall *nicht unterscheidbarer* Teilchen durch. Zeigen Sie, dass in diesem Fall für  $N \gg 1$  gilt:

$$\Delta\sigma \simeq 0. \quad (5)$$

Bitte wenden

**[H9] Gas im Potential****(4 Punkte)**

Gegeben sei ein klassisches Teilchen mit Phasenraumkoordinaten  $(x, p)$  und Hamiltonfunktion

$$H(x, p) = t(p) + v(x), \quad (6)$$

wobei  $t$  und  $v$  reelle Funktionen seien. Die Position  $x$  sei auf ein gegebenes Volumen  $V$  eingeschränkt. Für die Berechnung von Zustandssummen oder Entropien legen wir zugrunde, dass das Maß im Zustandsraum (Phasenraum)  $dx dp/h$  ist. Sei  $Z_1$  die kanonische Zustandssumme des Einteilchensystems bei Temperatur  $\tau$  im Fall  $v(x) = 0$ .

Betrachten Sie mehrere unabhängige und *ununterscheidbare* Teilchen obiger Art im großkanonischen Ensemble.

- (a) Zeigen Sie für allgemeines  $v(x)$ , dass für die großkanonische Zustandssumme  $\mathcal{Z}$  bei Temperatur  $\tau$  und Fugazität  $\lambda = e^{\mu/\tau}$  gilt

$$\mathcal{Z} = \exp\left(\frac{\lambda Z_1}{V} \int e^{-v(x)/\tau} dx\right). \quad (7)$$

- (b) Zeigen Sie, wieder für allgemeines  $v(x)$ , dass für die mittlere Teilchenzahl  $\langle N \rangle$  gilt

$$\langle N \rangle = \frac{Z_1}{V} \int e^{(\mu - v(x))/\tau} dx. \quad (8)$$

**[H10] Zentrifuge****(3 Punkte)**

Betrachten Sie einen Kreiszyylinder mit Radius  $R$  und Länge  $L$ , der mit Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  um seine Symmetrieachse rotiert, und der ein ideales Gas aus Teilchen der Masse  $M$  enthält. Das System befinde sich im thermischen Gleichgewicht bei Temperatur  $\tau$ . Im mit dem Zylinder rotierenden Bezugssystem befinde sich das Gas in Ruhe. Nehmen Sie kleine Geschwindigkeiten für die Teilchen an, so dass Corioliskräfte vernachlässigbar sind. Sei  $n(0)$  die erwartete Teilchendichte auf der Rotationsachse. Zeigen Sie, dass die erwartete Teilchendichte im Abstand  $r$  zur Rotationsachse gegeben ist durch

$$n(r) = n(0) e^{M\omega^2 r^2 / (2\tau)}. \quad (9)$$

*Hinweis:* Betrachten Sie ein kleines Volumen im Abstand  $r$  von der Rotationsachse. Das Volumen befindet sich im thermischen und diffusiven Gleichgewicht mit dem restlichen Gas und unterliegt einem zentrifugalen Potential  $v(r)$ . Benutzen Sie dann das Ergebnis von [H9]. Die Zustandssumme für ein Teilchen der Masse  $M$  in einem Volumen  $V$  bei Temperatur  $\tau$  hat die Form

$$Z_1 = \left(\frac{\tau}{\alpha}\right)^{3/2} V, \quad (10)$$

mit einer festen Energie  $\alpha > 0$ .

**[H11] Doppelbesetzungs-Statistik**

**(6 Punkte)**

Betrachten Sie ein "Gas" nicht-wechselwirkender ununterscheidbarer Teilchen mit nicht-entarteten diskreten Energie-Eigenwerten  $\epsilon_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, J$ , in dem jedes Energieniveau von keinem, einem oder zwei, *aber nicht mehr* Teilchen besetzt werden kann.

- (a) Nehmen Sie zunächst an, dass nur ein einziges Energieniveau  $\epsilon_j$  zugänglich ist. Dann muss sich jedes vorhandene Teilchen auf dem Energieniveau  $\epsilon_j$  befinden, und der einzige Freiheitsgrad des System ist die Anzahl  $N$  existenter Teilchen. Bestimmen Sie die großkanonische Zustandssumme  $\mathcal{Z}_j$  bei gegebener Temperatur  $\tau$  und gegebenem chemischen Potential  $\mu$ .
- (b) Betrachten Sie jetzt alle Energieniveaus  $j = 1, 2, \dots, J$ . Sei  $\mathcal{Z}$  die entsprechende großkanonische Zustandssumme. Zeigen Sie, dass

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_1 \mathcal{Z}_2 \dots \mathcal{Z}_J. \quad (1)$$

Dies bedeutet, dass die Energieniveaus als unabhängige Systeme betrachtet werden können. Der Zustand jedes einzelnen Systems ist durch seine Besetzungszahl charakterisiert.

- (c) Berechnen Sie den Erwartungswert der Besetzungszahl  $f(\epsilon_j)$  für das Energieniveau  $\epsilon_j$ .
- (d) Es sei  $f_c(\epsilon) = e^{-(\epsilon-\mu)/\tau}$  der „klassische“ Erwartungswert für die Besetzungszahl der Energieniveaus  $\epsilon$ . Zeigen Sie, dass  $f(\epsilon) \rightarrow f_c(\epsilon)$  für  $(\epsilon - \mu)/\tau \rightarrow \infty$ .
- (e) Ist das System äquivalent zu einem System von Fermionen mit den gleichen Energieniveaus, bei dem aber nun jedes Energieniveau Multiplizität 2 hat? Begründen Sie Ihre Antwort, indem Sie für ein einzelnes Energieniveau die Zustandssumme und den Erwartungswert der Besetzungszahl berechnen.

**Bitte wenden**

**[H12] Poisson-Verteilung****(6 Punkte)**

Betrachten Sie ein ideales Gas ununterscheidbarer Teilchen. Die kanonische Zustandssumme bei Temperatur  $\tau$  und fester Teilchenzahl  $N$  sowie festem Volumen  $V$  ist

$$Z_N = \frac{1}{N!} (n_Q V)^N, \quad (2)$$

wobei  $n_Q$  die Quantenkonzentration ist.

- (a) Nehmen Sie an, das Gas befinde sich im thermischen und diffusiven Gleichgewicht, mit Erwartungswert  $n$  für die Teilchendichte und festem Volumen  $V$ . Es sei  $P(N)$  die Wahrscheinlichkeit, genau  $N$  Teilchen vorzufinden. Zeigen Sie, dass

$$P(N) = \frac{(nV)^N e^{-nV}}{N!}. \quad (3)$$

Dies ist die Poisson-Verteilung.

- (b) Zeigen Sie, dass tatsächlich

$$\sum_{N=0}^{\infty} P(N) = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{N=0}^{\infty} NP(N) = nV. \quad (4)$$

Firstly, a few words about this exercise course. You can form groups up to 3 persons. The solutions should be uploaded to StudIP in form of a PDF file or a Mathematica notebook into the corresponding folder. I will look at the latest version uploaded before 12:00 on the submission day. The solutions should contain the code, its output and comments describing what you do and why.

The preferred program is Mathematica. You can use other tools and languages (e.g. Python), but support is not guaranteed.

There is no strict grading system as these exercises are not about following a recipe. There are several ways to approach the problem, and many ways to shape your approach into a code. The exercises are not extensive: if you know what you're doing, you can solve them in a few lines.

If you have questions about this exercise, or if you're stuck, you can contact me via [zhilin@math.uni-hannover.de](mailto:zhilin@math.uni-hannover.de).

**[H13] The Ising model**

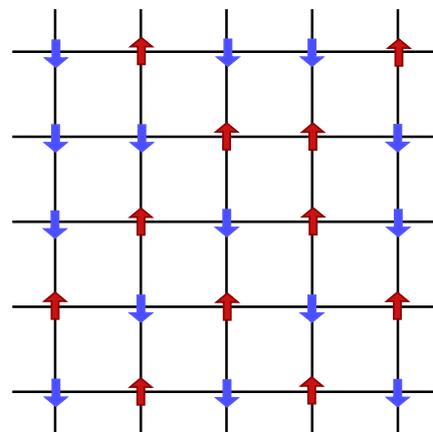
**(12 points)**

Let us play a bit with the Ising model. It is a famous toy model for ferromagnetism. Imagine a square lattice (we will stick to two dimensions), each site occupied by a spin  $s$ . Each spin can either point up ( $s = +1$ ) or down ( $s = -1$ ). Each link  $(i, j)$  connects two spins ( $s_i$  and  $s_j$ ) and contributes  $\epsilon_{ij} = -s_i s_j$  to the total energy. One can also turn on an external magnetic field  $h$ , so that each spin contributes additional  $\epsilon_i = -h s_i$ . Hence the total energy of a spin configuration  $\{s\}$  is

$$E(\{s\}) = - \sum_{(i,j)} s_i s_j - h \sum_i s_i.$$

You can see that it is energetically favourable for spins to point in the same direction. One might expect that at high temperatures the spins will point randomly, while at low temperatures they will spontaneously align. This is exactly what happens in ferromagnetic materials.

In what follows we will consider a  $64 \times 64$  periodic square lattice. Periodic means that, for example, a spin at site  $(1,1)$  interacts with spins at  $(1,2)$ ,  $(2,1)$ ,  $(1,64)$ ,  $(64,1)$ . Even for such a modest lattice it is hardly possible to sum over all  $2^{64 \times 64}$  configurations. The best we can do is to sample this sum by a stochastic process — in this exercise we will use the Metropolis algorithm.



An example of a spin lattice.

**Please turn**

To implement the Metropolis algorithm you can start with a lattice of randomly chosen spins. Then repeat the following steps:

1. Pick a random lattice site.
2. Calculate the energy  $\Delta E$  needed to flip the chosen spin.
3. If  $\Delta E < 0$ , flip this spin. Otherwise flip it with probability  $e^{-\Delta E/\tau}$  ( $\tau$  is the temperature).

This process generates a sequence of spin configurations  $\{s(t)\}$ , where  $t$  is the number of repetitions and can be thought of as a „time“ variable. If simulation time  $T$  is large enough, one can compute statistical averages  $\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} O(\{s\}) e^{-E(\{s\})/\tau}$  as time averages  $\langle O \rangle_T = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{t=T} O(\{s(t)\})$ .

Your **task** is to make an animation of the Metropolis algorithm at work. You can represent the lattice as an array of coloured squares, the colour representing the state of the corresponding spin. Make it possible to adjust the value of temperature  $\tau$  and magnetic field  $h$  in real-time without resetting the animation. **Explore** the behaviour of the system at different values of  $\tau$  and  $h$  (make sure that you update the lattice fast enough to see „thermal fluctuations“). **Estimate** roughly the critical temperature  $\tau_c$  that separates the ordered and disordered phases at  $h = 0$ .

**Compute** the correlation function  $\langle s_i s_j \rangle$  at zero magnetic field. This function depends on the temperature and on the distance  $d = |i - j|$  between the spins. For simplicity you can average over all pairs of spins that lie on the same vertical or horizontal line and are separated by distance  $d$ . Plot the correlation function as a function of  $d$  for several values of temperature above and below  $\tau_c$ . Check whether your computation is reliable, i.e. gives the same result every time you run your program.

*Bonus (4 points)* Compute the heat capacity (per site) and the disorder correlation function  $\langle \sigma_a \sigma_b \rangle$  at zero magnetic field. Plot the former as a function of  $\tau$ , and the latter as a function of separation  $d = |a - b|$  for several values of  $\tau$ . The disorder variables  $\sigma_a$  live on the dual lattice, i.e. on the centres of the squares formed by the links. Again, for simplicity let „dual“ sites  $a$  and  $b$  lie on a vertical or horizontal line. Connect these sites with a (shortest) line and mark the links crossed by the line. The presence of  $\sigma_a \sigma_b$  insertion is equivalent to flipping the interaction sign on the crossed links, i.e. each crossed link contributes  $s_i s_j$  instead of  $-s_i s_j$  to the energy. Compare the behaviour of  $\langle \sigma_a \sigma_b \rangle$  to that of  $\langle s_i s_j \rangle$ .

*Remark* You can learn more about the Metropolis algorithm and its use in statistical physics on the corresponding Wikipedia page.

**[H14] Wärmepumpe**

**(4 Punkte)**

Eine Wärmepumpe kann ein Gebäude heizen, indem sie einer externen Quelle (etwa der Außenluft) Wärme entzieht. Dadurch kann eine Wärmepumpe effizienter arbeiten als herkömmliche Heizungen. Sei  $\tau_i$  die Temperatur innerhalb eines geheizten Gebäudes, und sei  $\tau_o$  die Temperatur des Reservoirs (der Wärmequelle), welchem die Pumpe Wärme entzieht.

- (a) Nehmen Sie an, die Temperatur der Wärmequelle sei kleiner als die Temperatur im Gebäude, also  $\tau_o < \tau_i$ . Wie groß ist die Arbeit, welche die Pumpe je im Gebäude abgegebener Wärmeeinheit mindestens leisten muss, als Funktion von  $\tau_i$  und  $\tau_o$ ?
- (b) Nehmen Sie an, die Elektrizität für eine optimale Wärmepumpe werde durch eine Carnot-Maschine erzeugt, welche zwischen den Temperaturen  $\tau_o$  und  $\tau_h > \tau_o$  arbeitet. Wie groß ist das Verhältnis  $Q_h/Q_i$  zwischen der bei Temperatur  $\tau_h$  entzogenen Wärmemenge  $Q_h$  im Elektrizitätswerk und der bei  $\tau_i$  abgegebenen Wärmemenge  $Q_i$  im geheizten Gebäude? Vernachlässigen Sie Übertragungsverluste. Berechnen Sie das Verhältnis für den Fall  $\tau_h/k_B = 600$  K,  $\tau_i/k_B = 300$  K und  $\tau_o/k_B = 270$  K.

**[H15] Klimaanlage**

**(4 Punkte)**

Eine (idealisierte) Klimaanlage realisiert einen Carnot-Zyklus zwischen einer Außentemperatur  $\tau_o$  (Wärmeabgabeseite) und einer Zimmertemperatur  $\tau_i < \tau_o$  (Wärmeaufnahme-seite). Da das Zimmer nicht perfekt isoliert ist, nimmt es mit einer konstanten Rate  $A(\tau_o - \tau_i)$  Wärme von außen auf. Bestimmen Sie die Gleichgewichtstemperatur  $\tau_i$  im Zimmer als Funktion der Außentemperatur  $\tau_o$  und der Leistung  $P$  der Klimaanlage.

**Bitte wenden**

[H16] Entropieabnahme der Erde

(4 Punkte)

- (a) In [P19] haben wir den Energiefluss der von der Sonne auf die Erde treffenden Strahlung berechnet. Die Erde emittiert denselben Energiefluss als thermische Strahlung. Bestimmen Sie die minimale Rate, mit welcher die Entropie der Erde durch diesen Prozess zunehmen kann, als Funktion der Oberflächentemperatur  $\tau_E$  der Erde, der Oberflächentemperatur  $\tau_S$  der Sonne, und der von der Sonne empfangenen Leistung  $P$ . Die minimale Rate ist negativ, die Erde kann ihre Entropie in diesem Prozess also verringern. Diese Tatsache macht Selbstorganisation und Leben auf der Erde möglich.
- (b) In der Informationstheorie ist die Entropie ein Maß für den Mangel an bekannter Information über ein System. In diesem Zusammenhang ist die Entropie üblicherweise durch den Logarithmus zur Basis 2 der Anzahl zugänglicher Zustände definiert, und nicht durch den Logarithmus Naturalis. Berechnen Sie die Rate, mit welcher durch den Prozess in (a) Information über die Erde gewonnen werden kann. Schreiben Sie die Rate in Tb/s (Terabits pro Sekunde,  $1 \text{ Tb} = 10^{12} \text{ bits}$ ). Nehmen Sie an, dass die von der Sonne empfangene Leistung  $P \simeq 1,82 \cdot 10^{17} \text{ W}$  beträgt.

[H17] Wachstum von Biomolekülen

(4 Punkte)

Betrachten Sie das chemische Gleichgewicht einer Lösung linearer Polymere, die aus identischen Bausteinen (Monomeren) aufgebaut sind. Eine chemische Reaktion gliedert ein weiteres Monomer  $P_1$  an ein Polymer  $P_N$  aus  $N$  Monomeren an, so dass ein Polymer  $P_{N+1}$  aus  $N + 1$  Monomeren entsteht:



Sei  $K_N(\tau)$  die Gleichgewichtskonstante für diese Reaktion.

- (a) Zeigen Sie mit Hilfe des Massenwirkungsgesetzes, dass die Konzentration  $[N] = [P_N]$  von Polymeren aus  $N$  Monomeren folgende Form hat:

$$[N] = \frac{[1]^N}{K_1 K_2 \dots K_{N-1}}. \quad (2)$$

- (b) Zeigen Sie mit Hilfe der Theorie chemischer Reaktionen, dass unter den Bedingungen eines idealen Gases

$$K_N = \frac{n_Q(N)n_Q(1)}{n_Q(N+1)} e^{(F_{N+1}-F_N-F_1)/\tau} \quad (3)$$

gilt, wobei  $M_N$  und  $F_N$  die Masse und die freie Energie eines Polymers aus  $N$  Monomeren sind, und

$$n_Q(N) = \left( \frac{2\pi\hbar^2}{M_N\tau} \right)^{-3/2}. \quad (4)$$

- (c) Berechnen Sie für großes  $N$  das Verhältnis  $[N+1]/[N]$  bei Raumtemperatur ( $T = 300$  K). Nehmen Sie an, dass  $M_N \simeq M_{N+1}$ , und dass im Reaktionsschritt die freie Gesamtenergie erhalten bleibt, also

$$\Delta F := F_{N+1} - F_N - F_1 = 0. \quad (5)$$

Nehmen Sie weiter an, dass  $[1] = 10^{26} \text{ m}^{-3}$ , wie es für Aminosäuremoleküle innerhalb von Bakterienzellen gilt [Kittel, Am. J. Phys. **40**, 60 (1972)]. Das molekulare Gewicht eines Monomers sei  $3,3 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$ . Außerdem:  $\hbar \simeq 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg/s}$  und  $k_B \simeq 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg/s}^2/\text{K}$ .

- (d) Zeigen Sie, dass für großes  $N$  circa  $\Delta F < -0,4 \text{ eV}$  gelten muss, damit die Reaktion große Moleküle bevorzugt.

**Bitte wenden**

**[H18] Festkörper-Gas-Gleichgewicht****(8 Punkte)**

Die feste und die gasförmige Phase eines Materials befinden sich im thermischen, diffusiven und mechanischen Gleichgewicht. Dieser Zustand soll modelliert werden. Nehmen Sie an, die gasförmige Phase bilde ein klassisches ideales Gas. Die feste Phase bildet sich im Realfall aufgrund attraktiver Wechselwirkungen. Nehmen Sie der Einfachheit halber stattdessen an, das Material bestehe aus Teilchen, welche entweder vollkommen frei (Teil der Gasphase) sein können, oder in einem *dreidimensionalen* harmonischen Potential der Frequenz  $\omega$  gebunden sein können. Nehmen Sie weiter an, dass

- ein Teilchen eine Bindungsenergie  $-\epsilon_0$  erhält, wenn es in die feste Phase übergeht,
  - die Teilchen keine internen Freiheitsgrade haben,
  - die Gasphase sich in einem kubischen Volumeninhalt  $V = L^3$  befindet,
  - das von der festen Phase beanspruchte Volumen vernachlässigbar klein ist,
  - die Teilchen als lokalisierte Oszillatoren in der festen Phase *unterscheidbar*, aber in der Gasphase *ununterscheidbar* sind.
- (a) Berechnen Sie die großkanonischen Zustandssummen  $\mathcal{Z}_g$  und  $\mathcal{Z}_f$  der gasförmigen und der festen Phase.
- (b) Finden Sie den Erwartungswert  $\langle N \rangle$  der Teilchenzahl als Funktion der Fugazität  $\lambda$  in jeder der beiden Phasen.
- (c) Nehmen Sie an, die Teilchenzahl in der festen Phase sei groß. Benutzen Sie die Resultate aus (b), um den Druck  $p$  der Gasphase als Funktion der Temperatur und der konstanten Parameter  $M$ ,  $\epsilon_0$  und  $\omega$  zu berechnen.

*Hinweis:* Benutzen Sie

$$p = \tau \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_g}{\partial V} \quad (6)$$

sowie die in (b) gewonnenen Ausdrücke, um  $\lambda$  zu eliminieren.

- (d) Berechnen Sie mit Hilfe der Clausius–Clapeyron-Gleichung die latente Wärme  $L$  im Hochtemperaturlimes  $\tau \gg \hbar\omega$ . Zeigen Sie, dass

$$L \simeq \epsilon_0 - \frac{\tau}{2}. \quad (7)$$

The solution of this computer exercise can be done individually or by groups of maximum 3 persons. The solution should contain the working computer program, the outputs and clear description of what you did and why. You can use a separate PDF file to write your discussions. The preferred program is Mathematica, Python or C/C++. You can use other tools and languages but support is not guaranteed. You can upload your solution to the StudIP before 12:00 on the submission day.

If you have questions or comments about this exercise, please, contact me via [anas.abdelwahab@itp.uni-hannover.de](mailto:anas.abdelwahab@itp.uni-hannover.de).

**[H19] Deviation from ideal gas**

**(12 points)**

Consider a system of atoms in a box of volume  $V = L^3$  and temperature  $\tau$ . The number of particles is  $N$ . The position of particle  $i$  is given by  $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ , and they fulfill periodic boundary conditions, i.e.  $x_i \simeq x_i + L$ ,  $y_i \simeq y_i + L$ , and  $z_i \simeq z_i + L$ . The interaction between these particles can be described using the Lennard-Jones potential

$$\Phi_{LJ}(|r_i - r_j|) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{|r_i - r_j|} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{|r_i - r_j|} \right)^6 \right], \quad (1)$$

where  $\sigma$  and  $\epsilon$  are Lennard-Jones parameters (we choose  $\sigma = 1$  and  $\epsilon = 1$ ). However, we restrict the range of interaction to be zero after a certain length  $r_{cut}$ , i.e.

$$\Phi(|r_i - r_j|) = \begin{cases} \Phi_{LJ}(|r_i - r_j|) - \Phi_{cut} & \text{if } |r_i - r_j| \leq r_{cut} \\ 0 & \text{if } |r_i - r_j| > r_{cut} \end{cases} \quad (2)$$

where  $\Phi_{cut} = \Phi_{LJ}(r_{cut})$ . The average pressure is given by

$$\langle p \rangle = n\tau - \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1+1}^N 48\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{|r_i - r_j|} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{|r_i - r_j|} \right)^6 \right] \right\rangle, \quad (3)$$

where  $\langle \dots \rangle$  denotes the average over the configuration  $\{r_1, \dots, r_N\}$  generated below, and  $n = N/V$ .

**Please turn**

One can use the Metropolis algorithm to calculate the average pressure similar to what has been done in the previous computer exercise, but instead of flipping a randomly selected spin a randomly selected particle is given a random displacement. Therefore, the calculations contain the following steps:

1. Set the initial configuration by locating the particles orderly in a cube with the volume  $V$  (e.g. construct a simple cubic crystal structure).
2. Calculate the energy of the configuration,

$$E_c = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \Phi(|r_i - r_j|). \quad (4)$$

3. Give a random displacement for the selected particle such that  $x_i \rightarrow x_i + l\delta_1$ ,  $y_i \rightarrow y_i + l\delta_2$  and  $z_i \rightarrow z_i + l\delta_3$ , where  $\delta_i$  are random numbers in the range  $[-1, 1]$  and  $l$  is the amplitude of the displacement.
4. Calculate the energy difference between the new and the previous configuration, and accept or reject the new configuration applying the same condition as used for the Ising model.
5. Continue the iteration and calculate the average quantities.

For  $N = 265$ ,  $\Phi_{cut} = 2.5 \epsilon$ ,  $l = \frac{L}{2}$  and  $\tau = 2$  calculate the pressure for several values of  $n$  up to  $n = 1$ , and fit the pressure to the virial expansion

$$p(n) = n\tau + B_2n^2 + B_3n^3 + \dots \quad (5)$$

How many terms are needed for each value of  $n$ ? Repeat your calculations for  $\tau = 0.4, 0.6, 0.8, 1.1$  and discuss your results. Produce dynamical visualizations of your results.

**[H20] Van-der-Waals-Gas**

**(5 Punkte)**

Betrachten Sie ein Van-der-Waals-Gas mit fester Teilchenzahl  $N$ .

- (a) Drücken Sie die Entropie  $\sigma$  des Gases als Funktion des Volumens  $V$  und der Temperatur  $\tau$  aus. (Benutzen Sie die Quantenkonzentration  $n_Q \sim \tau^{3/2}$ .)
- (b) Drücken Sie die Gesamtenergie  $U$  ebenfalls als Funktion von  $V$  und  $\tau$  aus.
- (c) Drücken Sie die Enthalpie  $H = U + pV$  sowohl als Funktion von  $\tau$  und  $V$  aus, als auch als Funktion von  $\tau$  und dem Druck  $p$ . Beschränken Sie sich in beiden Fällen auf Terme erster Ordnung in den Parametern  $a$  (Kohäsionsdruck) und  $b$  (Kovolumen).

**[H21] Phasenübergang erster Ordnung im Kristall****(7 Punkte)**

Betrachten Sie einen Kristall, dessen Struktur sich in zwei möglichen Phasen  $\alpha$  und  $\beta$  befinden kann. Bei niedrigen Temperaturen sei die  $\alpha$ -Phase stabil, bei hohen Temperaturen die  $\beta$ -Phase. Die Energiedichte hat einen temperaturabhängigen elastischen Anteil  $U_{\text{el}}(\tau)$  und einen konstanten Nullpunktsanteil  $U(0)$ . Beide Anteile sind phasenabhängig. Der elastische Anteil besteht aus Anregungen akustischer Moden (Phononen). Am Temperaturnullpunkt ist die elastische Energiedichte gleich Null:  $U_{\text{el}}(0) = 0$ .

Der Energienullpunkt sei gegeben durch den Zustand, bei dem alle Atome unendlich weit separiert sind. Die Energiedichte  $U(0)$  bei  $\tau = 0$  ist dann negativ. Bei  $\tau = 0$  ist die stabile Phase diejenige geringerer Energiedichte, also ist  $U_{\alpha}(0) < U_{\beta}(0)$ .

- (a) Bei Temperaturen weit unter der *Debye-Temperatur*  $\theta$  beträgt die Energiedichte  $U$  von Phononen

$$U = c\tau^4, \quad c = \frac{3\pi^4}{5(k_{\text{B}}\theta)^3} \frac{N}{V}, \quad \theta = \frac{\hbar v}{k_{\text{B}}} \left(6\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} \quad \Rightarrow \quad c = \frac{\pi^2}{10\hbar^3 v^3}. \quad (1)$$

Hierbei ist  $v$  die Schallgeschwindigkeit. Zeigen Sie, dass die Dichte  $F_{\text{el}}$  der freien Energie von Phononen in einem Festkörper bei Temperaturen weit unterhalb der Debye-Temperatur  $-\pi^2\tau^4/(30\hbar^3v^3)$  beträgt. Verwenden Sie die obige Debye-Näherung, mit Geschwindigkeit  $v$  für alle Phononen.

- (b) Zeigen Sie, dass für die Übergangstemperatur  $\tau_c$  zwischen den beiden Phasen gilt

$$\tau_c^4 = \frac{30\hbar^2}{\pi^2} \frac{U_{\beta}(0) - U_{\alpha}(0)}{v_{\beta}^{-3} - v_{\alpha}^{-3}}. \quad (2)$$

Die Gleichung hat eine endliche reelle Lösung, falls  $v_{\beta} < v_{\alpha}$  (siehe die Bemerkung unten). Die Relation (2) modelliert eine Klasse tatsächlicher Phasenübergänge in Festkörpern.

- (c) Die latente Wärme eines Phasenübergangs ist die thermische Energie, die aufgewendet werden muss, um den Phasenübergang zu vollziehen. Zeigen Sie, dass für die latente Wärme  $L$  in diesem Modell gilt:

$$L = 4(U_{\beta}(0) - U_{\alpha}(0)). \quad (3)$$

*Hinweis:* Da es sich um einen Festkörper handelt, können Sie eine mögliche Änderung der Teilchendichte oder des Drucks zwischen den beiden Phasen vernachlässigen.

*Bemerkung:* Kleinere Schallgeschwindigkeiten gehen mit geringeren Elastizitätsmoduln einher und bedingen größere Amplituden der thermischen Anregungen. Im vorliegenden Modell hat die  $\beta$ -Phase die geringere Schallgeschwindigkeit. Bei stärkerer thermischer Anregung ist die Entropie größer und die freie Energie geringer. Weiche Systeme sind typischerweise bei hohen Temperaturen stabil, harte Systeme bei geringen Temperaturen.

[H21] Transfermatrix für das Isingmodell

(12 Punkte)

Betrachten Sie das eindimensionale Ising-Modell mit  $N$  Gitterplätzen und Hamiltonoperator

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}, \quad J > 0, \quad (1)$$

mit periodischen Randbedingungen, so dass  $\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1$ . Für dieses System existiert eine diagonalisierbare  $2 \times 2$  Transfermatrix  $T$ , welche es erlaubt, die Zustandssumme  $Z$  exakt zu bestimmen.

(a) Zeigen Sie, dass

$$Z = \text{tr}(T^N), \quad (2)$$

mit der Transfermatrix

$$T = \begin{pmatrix} e^{+J/\tau} & e^{-J/\tau} \\ e^{-J/\tau} & e^{+J/\tau} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

(b) Drücken Sie  $Z$  durch  $J$ ,  $\tau$  und  $N$  aus, indem Sie die Spur in (2) auswerten.

*Hinweis:* Berechnen Sie die Eigenwerte von  $T$ .

(c) Berechnen Sie die freie Energie je Spin im thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$ . Gibt es einen Phasenübergang?

(d) Benutzen Sie die Transfermatrix, um die Korrelationsfunktion  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$  für beliebige  $i$  und  $j$  zu berechnen.

*Hinweis:* Zeigen Sie, dass  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = Z^{-1} \text{tr}(P_z T^{j-i} P_z T^{N-(j-i)})$ , wobei

$$P_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Nutzen Sie aus, dass die Eigenvektoren von  $T$  unabhängig von  $\tau$  und  $J$  sind.

(e) Zeigen Sie, dass im thermodynamischen Limes  $N \rightarrow \infty$  für endliche  $|j - i|$  gilt:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = e^{-|j-i|/\xi(\tau)}, \quad (5)$$

wobei  $\xi(\tau)$  die Korrelationslänge ist. Berechnen sie  $\xi(\tau)$ .



**[Z1] Fiktive Thermodynamik**

**(8 Punkte)**

Wir erfinden ein ideales Gas, welches im klassischen Grenzwert für große  $N$  charakterisiert ist durch eine (hypothetische) freie Energie

$$F(V, N, \tau) = \tau N \left( \ln \frac{N}{V} - \frac{\tau}{\tau_0} - 1 \right), \quad (1)$$

wobei  $V$  das dem Gas zugängliche Volumen,  $N$  die mittlere Anzahl der Gasteilchen,  $\tau$  die Temperatur und  $\tau_0$  eine positive Konstante ist.

- (a) Berechnen Sie die interne Energie  $U(V, N, \tau)$ , den Druck  $p(V, N, \tau)$  und die Entropie  $\sigma(V, N, \tau)$  des Systems.
- (b) Wie viel Arbeit  $W$  ist mindestens erforderlich, um das Gas von einem Volumen  $V_1$  auf ein Volumen  $V_2$  zu komprimieren, wobei die Temperatur  $\tau$  und die Teilchenzahl  $N$  konstant gehalten werden?
- (c) Lassen Sie nun im Unterschied das Gas isentropisch (d. h. ohne Entropieänderung) expandieren, vom Volumen  $V_2$  zurück zum Volumen  $V_1$ . Die Teilchenzahl  $N$  soll dabei unverändert bleiben. Wenn die Ausgangstemperatur (bei  $V_2$ ) den Wert  $\tau$  hat, wie groß wird die Endtemperatur  $\tau'$  (bei  $V_1$ ) sein?

**Bitte wenden**

[Z2] Kanonische Ensembles

(12 Punkte)

Betrachten Sie ein Quantensystem, dessen Hamilton-Operator einen nichtentarteten Eigenwert 0, einen Eigenwert  $\epsilon > 0$  mit zweifacher Entartung und *keine weiteren* Eigenwerte besitzt.

- (a) Nehmen Sie an, das System sei im thermodynamischen Gleichgewicht bei einer Temperatur  $\tau$ . Drücken Sie die mittlere innere Energie  $U$  und die Entropie  $\sigma$  durch  $\epsilon$  und  $\tau$  aus.
- (b) Wir bezeichnen dieses System als „Teilchen“. Betrachten Sie zwei solche Teilchen im thermischen Gleichgewicht bei einer Temperatur  $\tau$  und nehmen Sie an, es seien (ununterscheidbare) *Bosonen* ohne Wechselwirkung. Geben Sie die erwartete innere Energie  $U$  an.
- (c) Lassen Sie nun die Anzahl dieser Bosonen variieren, wobei die Teilchen sowohl in thermischem Gleichgewicht (bei Temperatur  $\tau$ ) als auch in diffusivem Gleichgewicht mit Fugazität  $\lambda$  seien. Geben Sie die großkanonische Zustandssumme (Gibbs-Summe)  $\mathcal{Z}$  und die mittlere innere Energie  $U$  an.
- (d) Nehmen Sie alternativ an, dass es sich bei den Teilchen um *Fermionen* handelt. Wiederum sollen sie im thermischen Gleichgewicht bei Temperatur  $\tau$  und in diffusivem Gleichgewicht mit Fugazität  $\lambda$  sein. Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme (Gibbs-Summe)  $\mathcal{Z}$  sowie die mittlere Teilchenzahl  $N$ .

*Hinweis:* Zur Erinnerung: Für  $|x| < 1$  ist  $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1/(1-x)$ .