$\boxed{1}$ $\boxed{14}$

a) 6

$$Z_k = \sum_{\substack{\text{alle Mikrozustände} \\ \{q\}}} e^{-\beta H} = \sum_{\{q\}} e^{+\beta \cdot D \cdot \varepsilon \sum_{n=1}^{N} \vec{q_n} \cdot \hat{\vec{z}}}$$

+1P

Da $H(q)$ in Einteilchenhamiltonfunktionen separiert, können wir schreiben:

$$Z_k(N) = [Z_k(1)]^N$$

+2P: Z_k faktorisiert, auch OK $\sum_{q_{z_1}=-1}^{+1} \dots \sum_{q_{z_N}=-1}^{+1}$

$$Z_k(1) = \underbrace{\sum_{q_z=-1}^{+1}}_{+1P} e^{-\beta D \varepsilon q_z} = \underline{e^{+\beta D \varepsilon} + e^{-\beta D \varepsilon}} = \underline{2 \cosh\left(\frac{D\varepsilon}{k_B T}\right)} \Rightarrow$$

+1P $e^{x} + e^{-x} = 2\cosh(x)$

$$Z_k(N) = \left[2 \cosh\left(\frac{D\varepsilon}{k_B T}\right)\right]^N$$

$$F = -k_B T \ln Z_k \Rightarrow$$

+1P: Ansatz

$$\boxed{F(\varepsilon, T, N) = -k_B T N \ln\left[2 \cdot \cosh\left(\frac{D\varepsilon}{k_B T}\right)\right]}$$

b) 4

$$\left\langle \sum_{n=1}^{N} \vec{q_n} \cdot \hat{\vec{z}} \right\rangle = \frac{1}{Z_k} \sum_{\{q\}} \sum_{n=1}^{N} \vec{q_n} \cdot \hat{\vec{z}} \cdot e^{+\beta D \varepsilon \sum_{n=1}^{N} \vec{q_n} \cdot \hat{\vec{z}}} =$$

+1P: Ansatz

$$= \frac{\partial}{\partial(\beta D \varepsilon)} \ln Z_k$$

+1P: $\beta\lambda = \beta D\varepsilon$ oder $\beta(D\varepsilon + \lambda)$

$(\lambda \to 1)$ $(\lambda \to 0)$

(b) (a)

$$\left\langle \sum_{n=1}^{N} \vec{q}_n \cdot \vec{\tfrac{1}{2}} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial(\beta D\varepsilon)} N \cdot \ln\left[2 \cdot \cosh(\beta D\varepsilon)\right] =$$

$$= N \cdot \frac{1}{\cosh(\beta D\varepsilon)} \cdot \sinh(\beta D\varepsilon) = N \cdot \tanh(\beta D\varepsilon)$$

+1P: Ableitung

+1P: Einsetzen $\lambda = 0$ (a) oder $\lambda = D\varepsilon$ (b)

$$\Rightarrow \boxed{\frac{1}{N} \left\langle \sum_{n=1}^{N} \vec{q}_n \cdot \vec{\tfrac{1}{2}} \right\rangle = \tanh\left(\frac{D\varepsilon}{k_B T}\right)}$$

c)

$$C_V = T \cdot \left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_{V,N} = -T \left.\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right|_{V,N}$$

+0,5P　　+0,5P: Ansatz über F

- Für $\varepsilon \to 0$ gilt: $H(q) \to 0$ damit ist die Energie verschwindend und somit auch die Wärmekapazität. +0,5P

$$\boxed{C_V(\varepsilon \to 0) = 0}$$

$\Rightarrow$ $C_V = 0$ +0,5P

- Für $\varepsilon \to \infty$ sind alle Dipolmomente starr ausgerichtet +0,5P und können $\Rightarrow$ nicht thermisch fluktuieren. +0,5P Damit ist die Wärmekapazität ebenfalls verschwindend.

$$\boxed{C_V(\varepsilon \to \infty) = 0}$$ +0,5P

2 12

a) 3

- hermitsch: $\hat{\rho}^{+} = \hat{\rho}$ +1P

- positiv semi-definit:

  $\forall$ Eigenwerte p_i von $\hat{\rho}$ gilt: $p_i \geq 0$ +1P
  oder $\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0 \quad \forall |\psi\rangle$

- normiert: $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = 1$ +1P

b) 1

Für die Zeitentwicklung von $\hat{\rho}$ gilt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \Rightarrow \hat{\rho} \text{ stationär für } \boxed{[\hat{H}, \hat{\rho}] = 0}$$

(LV)

+1P

(+0,5P für (LV) only)

c) 2

$$\hat{\rho}(\alpha) = \frac{1}{N(\alpha)} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

+1P: $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}(\alpha)\} = 1$

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}(\alpha)] = \frac{1}{N(\alpha)}(2\alpha + 2) \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow$$

$$\boxed{N(\alpha) = 2(\alpha + 1)}$$ +1P

d) 2

Variante 1:

+1P: rank $\hat{\rho} = 1$

$\hat{\rho}$ ist genau dann rein, wenn der Rang von $\hat{\rho}$ 1 ist.

Die 2. und 3. Zeile sind ident. Die 1. und 4. Zeile l.a. v. 2&3 $\Leftrightarrow \alpha = 0$ +1P können nur mit $\alpha = 0$ von der 2. und 3. linear abhängig gemacht werden. $\Rightarrow \boxed{\alpha = 0}$

Variante 2:

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}^2] \overset{!}{=} 1$$ +1P

$$\begin{array}{c|c} & \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix} \\ \hline \frac{1}{N^2(\alpha)} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix} & \begin{matrix} 2\alpha^2 & & & \\ & 2 & & \\ & & 2 & \\ & & & 2\alpha^2 \end{matrix} \end{array} \Rightarrow$$

+0,5P: $\hat{A}^2$ gerechnet

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}^2] = \frac{1}{\cancel{4}(\alpha+1)^2} \cancel{4}(\alpha^2+1) = \frac{\alpha^2+1}{(\alpha+1)^2} \overset{!}{=} 0$$

$$\cancel{\alpha^2} + \cancel{1} = \cancel{\alpha^2} + 2\alpha + \cancel{1} \Rightarrow \boxed{\alpha = 0}$$ +0,5P

e) (4)

$$\frac{1}{N(\alpha)} \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

(1) $$\hat{\rho}_1 = \langle \uparrow_2 | \hat{\rho}(\alpha) | \uparrow_2 \rangle + \langle \downarrow_2 | \hat{\rho}(\alpha) | \downarrow_2 \rangle =$$

$$= \frac{1}{N(\alpha)} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{N(\alpha)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} = \frac{1}{2(\alpha+1)} \begin{pmatrix} \alpha+1 & 0 \\ 0 & \alpha+1 \end{pmatrix}$$

+1P: in Form $\hat{A}/N$

$$= \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$ +1P

(2)

$$\hat{\rho}_2 = \langle \uparrow_1 | \hat{\rho}(\alpha) | \uparrow_1 \rangle + \langle \downarrow_1 | \hat{\rho}(\alpha) | \downarrow_1 \rangle =$$

$$= \frac{1}{N(\alpha)} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{N(\alpha)} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

+1P: in Form $\hat{A}/N$ +1P

3 $\boxed{14}$

$$\hat{H}_n = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & c/2 \\ c/2 & \varepsilon_1 \end{pmatrix}$$

a) 7 $\hat{H}_n$ diagonalisieren:

$$\left| \begin{pmatrix} \varepsilon_0 - \lambda & c/2 \\ c/2 & \varepsilon_1 - \lambda \end{pmatrix} \right| \overset{!}{=} 0$$

+1P: charakteristisches Polynom

$$(\varepsilon_0 - \lambda)(\varepsilon_1 - \lambda) - \frac{c^2}{4} = 0$$

$$\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_1 - \lambda(\varepsilon_0 + \varepsilon_1) + \lambda^2 - \frac{c^2}{4} = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda(\varepsilon_0 + \varepsilon_1) + \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_1 - \frac{c^2}{4} = 0 \implies$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_1}{2} \pm \underbrace{\sqrt{\frac{(\varepsilon_0 + \varepsilon_1)^2}{4} - \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_1 + \frac{c^2}{4}}}$$

+1P: Lösungsformel

$$\left[\frac{\varepsilon_0^2}{4} + \frac{\varepsilon_1^2}{4} + \frac{\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_0}{2} - \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_1 + \frac{c^2}{4}\right]^{1/2} =$$

$+\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{2} - \varepsilon_1 \varepsilon_2 = -\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{2}$ erkannt und $(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)/2$ faktorisiert

+1P!

$$\left[\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)^2}{4} + \frac{c^2}{4}\right]^{1/2} = \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)^2 + c^2}$$

$$\lambda_{1,2} = \tilde{\varepsilon} \pm \frac{\gamma}{2}$$ +1P: richtige Eigenwerte

$$Z_K(2) = \left[Z_K(1)\right]^2$$ +1P: Z_K faktorisiert

$$Z_K(1) = \sum_{i=1}^{2} e^{-\beta \lambda_i} = e^{-\beta(\tilde{\varepsilon} + \frac{\gamma}{2})} + e^{-\beta(\tilde{\varepsilon} - \frac{\gamma}{2})} =$$

+1P: Ansatz $Z_K(N=1)$

$$= e^{-\beta \tilde{\varepsilon}} \cdot 2\cosh\left(\frac{\beta\gamma}{2}\right)$$

+1P: $e^x + e^{-x} = 2\cosh(x)$ angewandt

$$\Rightarrow \quad Z_k(N=2) = \left[2 \cdot e^{-\beta\tilde{\varepsilon}} \cosh\left(\frac{\beta\gamma}{2}\right)\right]^2$$

b)

$$F(T, N=2) = -k_B T \ln Z_k(N=2)$$ +1P

$$= -2k_B T \ln\left[2 \cdot e^{-\beta\tilde{\varepsilon}} \cosh\left(\frac{\beta\gamma}{2}\right)\right] =$$

$$= -2k_B T \ln 2 \underbrace{- 2k_B T \ln e^{-\beta\tilde{\varepsilon}}}_{+\underbrace{2k_B\cancel{T} \cdot \beta \cdot \tilde{\varepsilon}}_{2\tilde{\varepsilon}}} - 2k_B T \ln\left[\cosh\left(\frac{\beta\gamma}{2}\right)\right]$$

+1P: T-abhängigkeit kürzen

+1P: für verschwindenden Term

$$= 2\tilde{\varepsilon} - 2k_B T \ln 2 - 2k_B T \ln\left[\cosh\left(\frac{\beta\gamma}{2}\right)\right]$$

Für $k_B T \gg \gamma$ also $1 \gg \beta\gamma$ gilt:

$$k_B T \ln\left[\cosh\left(\frac{\beta\gamma}{2}\right)\right] = k_B T \cdot \left\{\left(\frac{\beta\gamma}{2}\right)^2 \cdot \frac{1}{2} + O\left[(\beta\gamma)^4\right]\right\}$$

+1P Einsetzen $x = \beta\gamma/2$ in Entw. von $\ln \circ \cosh$

$$= k_B T \cdot \left\{\frac{1}{8} \frac{\gamma^2}{(k_B T)^2} + \ldots\right\} \Rightarrow$$ asymptotisch für $(k_B T) \to \infty$ nächst das langsamer als der lineare Term in F

+1P: $\frac{1}{\beta}\left(\frac{\beta\gamma}{2}\right)^2 \xrightarrow[\beta \to 0]{} 0$

$$\Rightarrow \quad F(T \gg \gamma/k_B, N=2) = 2\tilde{\varepsilon} - 2k_B T \ln 2$$

$$S(T, N=2) = -\left.\frac{\partial F}{\partial T}\right|_N \Rightarrow$$

+1P: Ansatz

$$\boxed{S(T \gg \gamma/k_B, N=2) = 2k_B \ln 2}$$

+1P: Ergebnis

c) 4 Bonus

$$Z_k(N) = [Z_k(1)]^N$$ +1P: Z_k faktorisiert

$$\gamma_N^2 = \Delta^2 + N^2 C^2$$ +0,5P

$$Z_k(N) = \left[2 \cdot e^{-\beta\tilde{\varepsilon}} \cosh\left(\frac{\beta\gamma_N}{2}\right)\right]^N \Rightarrow$$

$$F(T,N) = -k_B T N \ln 2 + N\tilde{\varepsilon}$$

+0,5P: N in F(N)

$$- k_B T N \ln\left[\cosh\left(\frac{\beta\gamma_N}{2}\right)\right]$$

Für große N:

$$2\cosh\left(\frac{\beta\gamma_N}{2}\right) \approx e^{\frac{\beta\gamma_N}{2}} \Rightarrow$$

+1P $e^{-x} \to 0$ in cosh

$$\ln\left[e^{+\frac{\beta\gamma_N}{2}}\right] = \frac{\beta\gamma_N}{2}$$ und $\gamma_N \approx N \cdot C$ +0,5P

$$\Rightarrow F(T,N) \approx -N k_B T \ln 2 + N \cdot \tilde{\varepsilon}$$ linear in N

$$- k_B T \cdot N \cdot \frac{\beta \cdot}{2} N \cdot C \mathrel{\hat{=}} O(N^2)$$

+0,5P

quadratisch in N

$\boxed{4}$ $\boxed{10}$

a)

$$Z_G = \mathrm{Tr}\left\{ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \right\} =$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{n_0, n_1, \dots \\ \text{mit } \sum_j n_j = N}} e^{-\beta \sum_j (e_j-\mu) n_j} =$$

+1P: $\mathrm{Tr}\{\dots\}$ in Diagonalform

$$= \sum_{n_0} \sum_{n_1} \dots e^{-\beta(e_0-\mu) n_0} \cdot e^{-\beta(e_1-\mu)\cdot n_1} \dots =$$

+1P: $\sum_N \sum_{\dots} \mapsto \sum_{n_0} \sum_{n_1} \dots$

$$= \prod_j \sum_{n_j} e^{-\beta(e_j-\mu)\cdot n_j}$$

+1P: $\sum \prod \mapsto \prod \sum$

Für Fermionen $n_j = 0, 1$ +1P: $n_j \in \{0,1\}$

$$Z_G = \prod_j 1 + e^{-\beta(e_j-\mu)}$$

$$J = -k_B T \ln Z_G = -k_B T \sum_j \ln\left[1 + e^{-\beta(e_j-\mu)}\right]$$

+0,5P: Ansatz für J

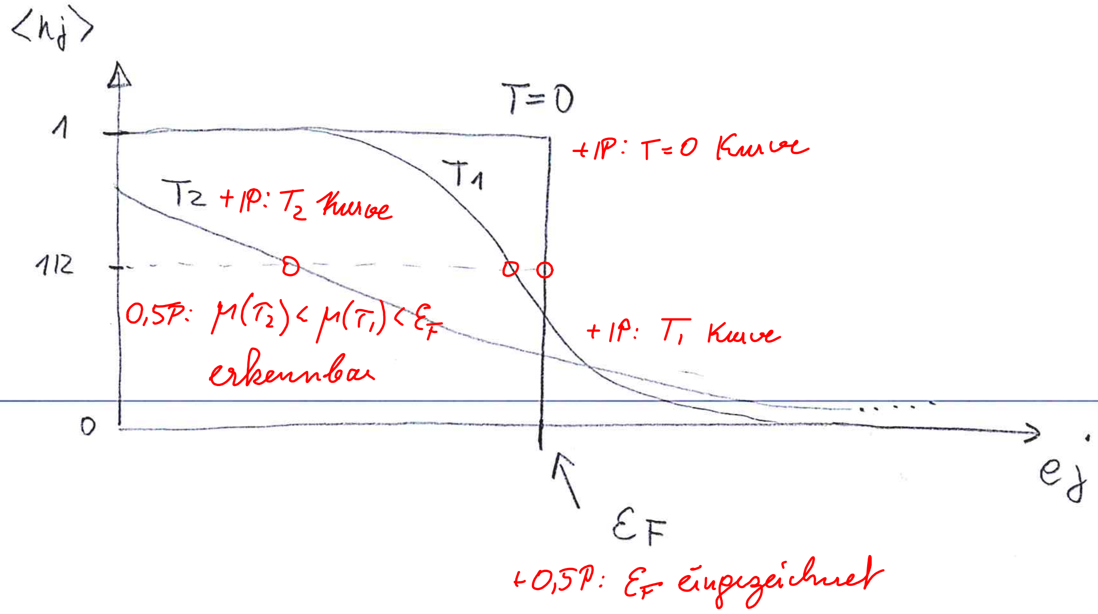
$$\langle N \rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = k_B \cancel{T} \sum_j \frac{1}{1+e^{-\beta(e_j-\mu)}} e^{-\beta(e_j-\mu)} \cdot \cancel{\beta}$$

+1P: Ansatz $\langle \hat{N} \rangle$

$$= \sum_j \frac{e^{-\beta(e_j-\mu)}}{1+e^{-\beta(e_j-\mu)}} = \sum_j \frac{1}{e^{\beta(e_j-\mu)}+1} = \sum_j \langle n_j \rangle \Rightarrow$$

$$\boxed{\langle n_j \rangle = \frac{1}{e^{\beta(e_j-\mu)}+1}}$$ +0,5P Rechnung

b)



$\langle n_j \rangle$
1
1/2
0
$T=0$
T_1
T_2
e_j
ε_F
+1P: T=0 Kurve
+1P: T_2 Kurve
+1P: T_1 Kurve
0,5P: $\mu(T_2) < \mu(T_1) < \varepsilon_F$ erkennbar
+0,5P: ε_F eingezeichnet