Universität Bonn
Physikalisches Institut
Theoretische Physik

Übungsblatt 6
13.11.2018
WS 18/19

Theoretische Physik IV (Statistische Physik)

Vorlesung: PD Dr. Stefan Förste
Übungsleitung: M.Sc. Fabian Fischbach

`http://www.th.physik.uni-bonn.de/people/fischbach/ws1819/tp4`

–Hausaufgaben–

Abgabe der Hausaufgaben: Di./Mi. 20./21.11.2018 (in den Übungen)
Besprechung der Hausaufgaben: Di./Mi. 27./28.11.2018 (in den Übungen)

H.6.1 Polymer-Modell (9 Punkte)

Wir beschreiben ein Polymer idealisiert durch eine lineare Kette von N Gliedern, welche je einen knickbaren Abschnitt besitzen. Die mikroskopischen Eigenschaften der Kette seien dabei wie folgt charakterisiert:

$$\text{Energie eines Kettengliedes:} \quad \begin{cases} \epsilon_- & \text{(ungeknickt)} \\ \epsilon_\wedge & \text{(geknickt)} \end{cases} \tag{1}$$

$$\text{Länge eines Kettengliedes:} \quad \begin{cases} \ell_- & \text{(ungeknickt)} \\ \ell_\wedge < \ell_- & \text{(geknickt)} \end{cases} . \tag{2}$$

a) Berechnen Sie für festgehaltene Länge L die kanonische Zustandssumme

$$Z_\mathrm{K}(T, L, N) = \sum_{\text{Zustände } n} e^{-\beta E_n} . \tag{3}$$

Hinweis: Beachten Sie, dass L, N und die Zahl der geknickten Glieder $n_\wedge$ nicht unabhängig sind und deshalb nur über Mikrozustände summiert wird, die der entsprechenden Relation genügen.

(*3 Punkte*)

b) Die freie Energie ist durch

$$F(T, L, N) = -k_\mathrm{B} T \log Z_\mathrm{K} \tag{4}$$

definiert. Begründen Sie durch Betrachtung des Differentials von F, dass die Kraft K, die auf die Kette wirkt, durch folgenden Ausdruck gegeben ist:

$$K = -\left(\frac{\partial F}{\partial L}\right)_{T,N} . \tag{5}$$

Hinweis: Vergleichen Sie mit dem allgemeinen Ergebnis $\mathrm{d}F(T, V, N) = -S_\mathrm{K}\, \mathrm{d}T - p\, \mathrm{d}V + \mu\, \mathrm{d}N$, wobei der letzte Term nur der Vollständigkeit halber aufgeführt wurde. Hier wird keine lange Rechnung erwartet. Das Vorzeichen ist Konvention.

(*3 Punkte*)

c) Bestimmen Sie mit dem Ergebnis (5) die Kraft $K(T, L, N)$. Gehen Sie dabei vom Grenzfall $N, n_\wedge \gg 1$ aus und schreiben Sie K als Funktion von T, L und N, wobei Sie alle Koeffizienten durch die mikroskopischen Parameter ausdrücken.
Hinweis: Verwenden Sie die Näherung $\log x! \approx x \log x$ für $x \gg 1$.
(*3 Punkte*)

H.6.2 Energiefluktuationen im kanonischen Ensemble (4 Punkte)

Für ein kanonisches Ensemble ist die relative Häufigkeit eines Einteilchenzustands $|n\rangle$ gegeben durch

$$W_\mathrm{K}(n) = \frac{1}{Z_K} \exp(-\beta E_n) \tag{6}$$

mit $\beta = 1/(k_\mathrm{B}T)$ und der Zustandssumme $Z_\mathrm{K} = \sum_{n'} \exp(-\beta E_{n'})$, wobei über alle Einteilchenzustände $|n'\rangle$ summiert wird.

a) Zeigen Sie, dass für das Schwankungsquadrat $(\Delta E)^2 = \langle (E - \langle E\rangle)^2\rangle$ folgende Beziehung gilt:

$$(\Delta E)^2 = k_\mathrm{B} T^2 \left(\frac{\partial \langle E\rangle}{\partial T}\right)_{V,N} . \tag{7}$$

(*2 Punkte*)

Die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen V (und Teilchenzahl N) ist definiert durch

$$C_V := T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,N} \tag{8}$$

und beschreibt die nötige Wärmemenge, um die Temperatur eines Körpers um 1 K zu erhöhen.

b) Drücken Sie $(\Delta E)^2$ durch C_V aus.
Hinweis: Im kanonischen Formalismus ist die (mittlere) Energie $\langle E\rangle$ eine Funktion der Temperatur T. Andererseits fordern wir die Konsistenz mit vorheriger Definition $T^{-1} = (\partial_{\langle E\rangle} S)_{V,N}$.[1]
(*2 Punkte*)

Somit wurde ein Zusammenhang zwischen der statistischen Beschreibung des Ensembles und einer seiner makroskopischen, thermodynamischen Eigenschaften hergestellt.

H.6.3 Legendre-Transformation (4 Punkte)

In dieser Aufgabe wollen wir uns an die Legendre-Transformation erinnern, die bereits in der theoretischen Mechanik eine wichtige Rolle beim Übergang vom Lagrange- zum Hamilton-Formalismus gespielt hat. In der statistischen Physik und Thermodynamik tritt sie beim Wechsel zwischen verschiedenen Sätzen von Zustandsvariablen auf.

[1] Für ein makroskopisches System 1 im Kontakt mit einem Wärmebad 2 ist die Energieverteilung $\omega(E_1)$ sehr scharf und der Mittelwert entspricht effektiv dem wahrscheinlichsten Wert, $\langle E_1\rangle \approx \tilde{E}_1$. Man kann leicht zeigen, dass die kanonische Entropie S_K dann (in sehr guter Näherung) gleich der mikrokanonischen Entropie zur Energie $\tilde{E}_1$ ist, $S_\mathrm{K} \approx S_\mathrm{MK}(\tilde{E}_1)$. Aus diesem Grunde schreiben wir einfach nur S zur Bezeichnung der Entropie und stellen die genannte Konsistenzforderung. Siehe hierzu die Unterabschnitte 2.4.2 und 2.6.5 in F. Schwabl, *Statistische Mechanik* (Springer, 3. Auflage 2006).

Sei $x \mapsto f(x)$ eine reellwertige, zweifach stetig differenzierbare Funktion in einer Variablen.[2] Die Idee der Legendre-Transformation ist es, aus f eine neue Funktion $\mathcal{L}(f)$ mit Abhängigkeit von $z := f'(x)$, nämlich die *Legendre-Transformierte* von f, zu konstruieren. Es gelte überall $f''(x) \neq 0$, sodass eine Umkehrfunktion h zu f' existiert. Wir schreiben also $x = h(z)$ und definieren $\mathcal{L}(f)$ durch[3]

$$\mathcal{L}(f)(z) = h(z)\ z - f(h(z))\ . \tag{9}$$

Wir machen uns die Konstruktion kurz an einem Beispiel klar.

a) Berechnen Sie die Legendre-Transformierte der auf $(0, \infty)$ definierten Funktion $x \mapsto f(x) = x^\alpha$ für reellen Exponenten $\alpha > 1$. (*2 Punkte*)

Wir kehren zum allgemeinen Fall zurück. Unter obigen Voraussetzungen ist die Transformation umkehrbar, d.h., $\mathcal{L}(f)$ enthält genauso viel Information wie f. Es gilt sogar, dass die Transformation *involutiv* ist, sie erfüllt also

$$\mathcal{L}(\mathcal{L}(f))(w) = f(w). \tag{10}$$

b) Beweisen Sie Gleichung (10) durch Nachrechnen. (*2 Punkte*)

Ihnen könnte hierbei aufgefallen sein, dass das totale Differential von $\mathcal{L}(f)$ sehr einfach durch $d(\mathcal{L}(f)) = x\ \mathrm{d}z$ ausgedrückt werden kann, was mit $df = z\ \mathrm{d}x$ zu vergleichen ist.

[2] In thermodynamischen Anwendungen kann eine Abhängigkeit weiterer Variablen bestehen, die im Folgenden aber keine Rolle spielen sollen (d.h. sie seien festgehalten) und deshalb nicht unserer Notation aufgeführt werden. Außerdem lässt sich die Legendre-Transformation bereits unter der schwächeren Voraussetzung definieren, dass f konvex (oder konkav), stetig und stückweise stetig differenzierbar ist.

[3] Gelegentlich wird die Legendre-Transformierte mit umgekehrten Vorzeichen definiert und entspricht hiesigem $-\mathcal{L}(f)$.