Theoretische Physik IV (Statistische Physik)

Vorlesung: Prof. Dr. Albrecht Klemm
Übungsleitung: M. Sc. Fabian Fischbach
http://www.th.physik.uni-bonn.de/people/fischbach/ws1920/tp4/index.php

–Hausaufgaben–

Abgabe der Hausaufgaben: Mo.-Mi. 18.-20.11.2019 (in den Übungen)
Besprechung der Hausaufgaben: Mo.-Mi. 25.-27.11.2019 (in den Übungen)

H.6.1 Energiefluktuationen im kanonischen Ensemble (4 Punkte)

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

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

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:

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

(*2 Punkte*)

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

$$C_V := T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V,N} \tag{3}$$

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.
<u>*Hinweis:*</u> 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.

[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).

H.6.2 Dopplerverbreiterung (4 Punkte)

Wir haben bereits die Maxwell-Boltzmann-Verteilung kennengelernt. Als Wahrscheinlichkeitsverteilung der Geschwindigkeit $\vec{v}$ eines Teilchens[2] lautet diese

$$w(\vec{v})\ \mathrm{d}^3v = \left(\frac{m\beta}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left(-m\beta\frac{\vec{v}^2}{2}\right)\ \mathrm{d}^3v\ , \tag{4}$$

wobei m die Masse eines jeden der N Teilchen bezeichnet und $\beta = 1/(k_\mathrm{B}T)$ mit der Temperatur T gilt. Als Anwendung wollen wir in dieser Aufgabe die Dopplerverbreiterung eines monochromatisch[3] emittierenden Gases berechnen. Wir nehmen an, dass sich die N Atome zunächst in einem angeregten Zustand befinden und beim Übergang in den Grundzustand Licht der Energie $E_0 = h\nu_0$ emittieren, wobei E_0 sich auf ein bei Emission ruhendes Atom bezieht. Gemäß relativistischem Dopplereffekt gilt für die Frequenz $\nu(v_z)$, die von einem Spektrometer in z-Richtung beobachtet wird, die Beziehung

$$\nu(v_z) = \nu_0\sqrt{\frac{c+v_z}{c-v_z}}\ . \tag{5}$$

Hier bezeichnet v_z die relative Geschwindigkeit zwischen Emitter und (ruhend angenommenem) Spektrometer in z-Richtung und c bezeichnet die Lichtgeschwindigkeit.

a) Wegen $\langle v_z/c\rangle \ll 1$ bei Raumtemperatur genügt es, $\nu(v_z)$ zu linearisieren. Bestimmen Sie in dieser Näherung die Verteilung von $w(v_z)\,\mathrm{d}v_z$ sowie die Form der Energieverteilung $I(E)\,\mathrm{d}E$ am Spektrometer.

(2 Punkte)

b) Bestimmen Sie außerdem den Mittelwert $\langle E\rangle$ der vom Spektrometer beobachteten Energie sowie die mittlere quadratische Abweichung $\Delta E := \sqrt{\langle(E-\langle E\rangle)^2\rangle}$. *(2 Punkte)*

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.

Sei $x \mapsto f(x)$ eine reellwertige, zweifach stetig differenzierbare Funktion in einer Variablen.[4] 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[5]

$$\mathcal{L}(f)(z) = h(z)\ z - f(h(z))\ . \tag{6}$$

[2] Beachten Sie, dass es hier, im Gegensatz zu Aufgabe H.4.1, nicht um die Verteilung des *Betrages* geht.

[3] Wir vernachlässigen also zum Beispiel die natürliche Linienbreite, die im Zusammenhang mit der endlichen Lebensdauer angeregter Energieniveaus steht und bei atomaren Vorgängen in einer kleineren Größenordnung als die thermisch bedingte Dopplerbreite bei Raumtemperatur liegt. Auch nehmen wir an, dass die Konzentration des Gases so gering ist, dass die Stoßverbreiterung keine Rolle spielt.

[4] 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.

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

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

$$\mathcal{L}(\mathcal{L}(f))(w) = f(w). \tag{7}$$

b) Beweisen Sie Gleichung (7) 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.