

1 Fluktuationen und Suszeptibilität (10 P) Auf dem letzten Blatt hatten wir die Mittelwerte von Magnetisierung und Energie im Ising-Paramagneten studiert und einige allgemeingültige Relationen zwischen diesen Größen und Ableitungen der Zustandssumme hergestellt.

Wir ergänzen in dieser Aufgabe die Mittelwerte um Aussagen über die Fluktuationen dieser Größen.

Gegeben sei ein Ising-Paramagnet mit Hamiltonfunktion $H = -h \sum s_i$.

- a) (5 P) Drücken Sie die Fluktuationen (d.h. Varianzen) der Energie, $\text{Var}(H) = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$, und der Magnetisierung, $\text{Var}(\mathcal{M})$ im kanonischen Ensemble für allgemeine Systeme durch die Zustandssumme und ihre Ableitungen aus. Berechnen Sie die Ausdrücke konkret für den Ising Paramagneten.

Hinweis: Bei der Magnetisierung für “allgemeine Systeme” nehmen Sie an, dass das externe Feld durch einen Term $-hs_i$ in die Hamiltonfunktion eingeht, so wie dies beim Ising-Paramagneten der Fall ist. Im Allgemeinen hat man es aber mit Wechselwirkungen zwischen den Spins zu tun, so dass die Hamiltonfunktion die Form $H(\{s_i\}, h) = \tilde{H}(\{s_i\}) - h \sum s_i$ hat. Z.b. $H = J \sum_{i,j} s_i s_j - h \sum_i s_i$

- b) (5 P) Nachdem Energie und Magnetisierung als Funktionen von Temperatur und externem Feld berechnet wurden, kann man sich fragen wie das System auf kleine Änderungen dieser externen Parameter reagiert.

Die entsprechende Größe der Energie $C = \partial_T E$ haben wir als Wärmekapazität schon in der Thermodynamik kennengelernt. Ihr Analogon $\chi = \partial_h M$ in Hinblick auf die Magnetisierung nennt man *magnetische Suszeptibilität*.

Berechnen Sie Wärmekapazität und Suszeptibilität für ein allgemeines System. Zeigen Sie, dass folgende Zusammenhänge zwischen Wärmekapazität/Suszeptibilität und den Fluktuationen der extensiven Größen besteht

$$C = \frac{\text{Var}(H)}{T^2} \quad \text{und} \quad \chi = \frac{\text{Var}(\mathcal{M})}{T}$$

Bemerkungen: Wir erkennen, dass verschiedene thermodynamische Größen als Ableitungen der Zustandssumme berechnet werden können. Es ist in der Tat so, dass die Zustandssumme die gesamte thermodynamische Information über das System enthält.

Weiter haben wir einen Zusammenhang zwischen den Antwortgrößen (hier: C und χ) und den Fluktuationen eines Systems im Gleichgewicht gefunden. Dieser Zusammenhang ist allgemein und tritt an verschiedensten Stellen in der statistischen Physik und z.B. Festkörpertheorie auf.

2 Der Gleichverteilungssatz (10 P) Vereinfacht besagt der Gleichverteilungssatz, dass jeder Freiheitsgrad, der quadratisch im Hamiltonian vorkommt, eine mittlere Energie von $k_B T/2$ besitzt. Das bedeutet z.B. dass eine freie Punktmasse in 3D im Gleichgewicht mit einem Wärmebad der Temperatur T und mit Hamiltonian $H = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m$ die mittlere kinetische Energie $\frac{3}{2}k_B T$ besitzt. Wir wollen an dieser Stelle eine leicht allgemeinere Form des Gleichverteilungssatzes beweisen:

- a) (4 P) Wir betrachten ein beliebiges klassisches System mit N Freiheitsgraden, beschrieben durch die Hamilton-Funktion $H(\{q_i, p_i\})$, das sich im Gleichgewicht mit einem Wärmereservoir der Temperatur T befindet. Zeigen Sie unter Verwendung der Boltzmann-Verteilung, dass

$$\left\langle x_j \frac{\partial H}{\partial x_i} \right\rangle = \delta_{ij} k_B T$$

gilt, wobei $x_1 = q_1, x_2 = q_2, \dots, x_N = q_N, x_{N+1} = p_1, x_{N+2} = p_2, \dots, x_{2N} = p_N$. Wir nehmen dazu an, dass $H(\{q_i, p_i\}) \rightarrow \infty$ für $q_i \rightarrow \pm\infty$ oder $p_i \rightarrow \pm\infty$.

- b) (3 P) Zeigen Sie mittels ihres in a) gefundenen Resultats, dass für die mittlere kinetische Energie einer Punktmasse in d Dimensionen gilt:

$$\langle E_{kin} \rangle = \left\langle \frac{m}{2} (v_1^2 + \dots + v_d^2) \right\rangle = d \frac{k_B T}{2}$$

- c) (3 P) Berechnen Sie mittels des Gleichverteilungssatzes die Wärmekapazitäten pro Molekül (bei konstantem Volumen) für monoatomare, diatomare und polyatomare Moleküle (in 3D). Dabei sind die Atome als Punktmassen zu betrachten und Moleküle als starre Körper.

3 Die plancksche Strahlungsformel (20 P) Wir hatten bereits durch rein mechanische und thermodynamische Betrachtungen das Stefan-Boltzmann-Gesetz hergeleitet, laut dem die Energiedichte eines Schwarzkörper-Strahlers mit der vierten Potenz der Temperatur anwächst.

Aus dieser Betrachtung erhielten wir jedoch nicht die *spektrale Energiedichte*, also die Energiedichte in Abhängigkeit von der Frequenz der Strahlung.

Historisch bildet die Strahlungsformel den Anfangspunkt der Quantentheorie. Planck hatte in seiner Herleitung postuliert, dass die Energie jeder Strahlungsmode quantisiert ist. Hier berechnen wir die Energiedichte aus den Besetzungszahlen der einzelnen Energieniveaus.

Bei der Schwarzkörperstrahlung hat man es mit einem Gas aus Photonen zu tun, das im thermischen Gleichgewicht mit der Umgebung, zum Beispiel den Wänden eines Behälters, steht. Die Wände sind in der Lage Photonen jeglicher Energie zu absorbieren und zu emittieren.

Deren Anzahl ist nicht festgelegt, sondern durch das Strahlungsgleichgewicht mit den Wänden gegeben. Daher ist es natürlich im großkanonischen Ensemble zu arbeiten.

Da Photonen masselose Bosonen mit Spin 1 sind, ist ihre Energie als Funktion des Impulses durch $\epsilon_{\mathbf{p}} = c\|\mathbf{p}\| = \hbar\omega$ gegeben und ihre Statistik durch die Bose-Einstein-Verteilung beschrieben. Jedes Photon kann dabei in zwei verschiedenen Einstellungen seines Spins vorkommen¹.

In einem endlichen System sind die Impulse eigentlich quantisiert. Hier wollen wir annehmen, dass das System groß ist und man dementsprechend Summen über Impulse durch Integrale nähern darf:

$$\sum_{\mathbf{p}} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p$$

Die großkanonische Zustandssumme für Bosonen ist laut Vorlesung durch

$$Z_{gk} = \prod_r \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_r - \mu)}}$$

gegeben, wobei das Produkt sich über alle möglichen Zustände eines Teilchens erstreckt.

- a) (2 P) Argumentieren Sie, dass das chemische Potential des Photonengases null ist.
- b) (10 P) Berechnen Sie die spektrale Energiedichte, d.h. die Dichte $u(\omega)d\omega$ so dass

$$\int_{\omega_1}^{\omega_2} u(\omega)d\omega = \int_{\hbar\omega_1 \leq \epsilon_{\mathbf{p}} \leq \hbar\omega_2} \langle m_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} \rangle d^3p$$

und erhalten so das Planck'sche Strahlungsgesetz.

Nähern Sie für kleine Frequenzen bzw. kleine Wellenlängen um das Rayleigh-Jeans-Gesetz und das wiensche Strahlungsgesetz herzuleiten.

Leiten Sie außerdem das wiensche Verschiebungsgesetz her, laut dem sich das Strahlungsmaximum bei $\lambda_{max} \sim T^{-1}$ befindet.

- c) (8 P) Berechnen Sie die freie Energie J , Druck p , Energiedichte u sowie Entropie S und leiten so erneut das Stefan-Boltzmann-Gesetz her.

Hinweis: $\int_0^\infty x^2 \ln(1 - e^{-x}) dx = -\frac{\pi^4}{45}$

¹genauer gesagt besitzen masselose Teilchen *Helizität*. Der Spin-0-Zustand existiert nicht. Dies äußert sich in der Transversalität elektromagnetischer Wellen.