Aufgabe 41: Gleichverteilungssatz und molare spezifische Wärmekapazität: mikrokanonisches Ensemble (3 Punkte)

Für ein klassisches N-Teilchensystem mit der Energie E im Volumen V, beschrieben durch

$$\mathcal{H}_N(p, q) = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} + V(q_1, \ldots, q_{3N}) ,$$

haben Sie den Gleichverteilungssatz kennengelernt. Es gilt:

$$\left\langle p_i \frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial p_i} \right\rangle = \left\langle q_i \frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial q_i} \right\rangle = k_B T \qquad \forall\, i = 1, 2, \ldots, 3N .$$

a) Zeigen Sie, dass die molare spezifische Wärmekapazität eines idealen, einatomigen Gases $C_V = \frac{3}{2} R$ ist.
Hinweis: Betrachten Sie dazu die Temperaturabhängigkeit von $\langle \mathcal{H}_N \rangle$.

b) Zeigen Sie, dass die molare spezifische Wärmekapazität eines Festkörpers, der durch

$$\mathcal{H}_N(p, q) = \sum_{i=1}^{3N} \left\{ \alpha_i p_i^2 + \beta_i q_i^2 \right\}$$

beschrieben wird, durch $C_V = 3R$ gegeben ist (Dulong-Petit Gesetz).

Aufgabe 42: Gleichverteilung: kanonisches Ensemble (4 Punkte)

Betrachten Sie ein klassisches N-Teilchensystem im Volumen V bei der Temperatur T. Zeigen Sie:

a) Wenn die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}_N(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{6N} \gamma_i x_i^\nu$$

lautet, so folgt: Die Energie des Systems pro Freiheitsgrad ist $\langle \gamma_i x_i^\nu \rangle = \frac{1}{\nu} k_B T$ für alle i.

b) Für die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}_N(\mathbf{x}) = \mathcal{H}_N(p, q) = \sum_{i=1}^{3N} (\alpha_i p_i^2 + \beta_i q_i^2)$$

gilt: Die Energie pro Freiheitsgrad ist $\frac{1}{2} k_B T$.

Aufgabe 43: Elektrische Polarisation eines diatomaren, idealen Gases: kanonisches Ensemble (7 Punkte)

Ein ideales Gas aus N diatomaren Molekülen mit statischem Dipolmoment $\mathbf{p}$ und Gesamtmasse M im Volumen V befinde sich in einem äußeren elektrischen Feld $\mathbf{E}$.

Die Hamiltonfunktion irgendeines Moleküls des Gases ist dann durch

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{trans}} + \frac{p_\theta^2}{2\,I} + \frac{p_\varphi^2}{2\,I\,\sin^2\theta} - \mathsf{p}\,\mathcal{E}\,\cos\theta$$

gegeben, wobei p_θ und p_φ die zu θ und φ kanonisch konjugierten Impulse sind und I das Trägheitsmoment des Moleküls ist. θ ist der Winkel zwischen dem statischen Dipolmoment $\mathbf{p}$ und dem elektrischen Feld $\mathbf{E} = (0,\,0,\,\mathcal{E})$.

Die freie Energie dieses Systems ist

$$F\,(T,\,V,\,N,\,\mathcal{E}) = U - T\,S - \mathcal{E}\,\mathcal{P}\ ,$$

wobei $\mathcal{P}$ die zu $\mathbf{E}$ parallele Komponente des elektrischen Gesamtdipolmomentes (extensiv!) des Systems und $\mathcal{P}/V =: P\,(T,\,V,\,N,\,\mathcal{E})$ die mittlere elektrische Polarisation ist.

a) Zeigen Sie, dass die mittlere Polarisation $P\,(T,\,V,\,N,\,\mathcal{E})$ dieses Gases durch

$$P = \frac{\mathcal{P}}{V} := -\frac{1}{V}\,\frac{\partial F}{\partial \mathcal{E}}\Big|_{T,\,V,\,N} = \frac{N\,\mathsf{p}}{V}\left\{\coth\left(\frac{\mathsf{p}\,\mathcal{E}}{k_B\,T}\right) - \frac{k_B\,T}{\mathsf{p}\,\mathcal{E}}\right\} =: \frac{N\,\mathsf{p}}{V}\,L\left(\frac{\mathsf{p}\,\mathcal{E}}{k_B\,T}\right)$$

gegeben ist. Dabei ist $L\,(x)$ die so genannte Langevin-Funktion.

b) Diskutieren Sie L als Funktion von x und P als Funktion von $\mathcal{E}$ für verschiedene T.

c) Geben Sie die Polarisation bei schwachem äußerem Feld bzw. für hohe Temperaturen, d. h. $\mathsf{p}\,\mathcal{E} \ll k_B\,T$, und für den Fall $\mathsf{p}\,\mathcal{E} \gg k_B\,T$ an.

d) Interpretieren Sie die Ergebnisse aus b) und c).

Aufgabe 44: Paramagnetismus eines idealen Spinsystems: kanonisches Ensemble (6 Punkte)

Betrachten Sie ein ideales System von N wechselwirkungsfreien Elektronenspins im Volumen V. Dies könnte z. B. ein Alkali-Kristall sein, bei dem wir von jedem Atom nur den Spin des äußeren, ungepaarten s-Elektrons berücksichtigen und alle anderen Freiheitsgrade vernachlässigen. Jedes Elektron hat ein magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu} = 2\,\mu_B\,\mathbf{s}$ und es hat daher in einem konstanten Magnetfeld $\mathbf{B} = (0,\,0,\,B)$ die Energie $E = -\,\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = -2\,\mu_B\,B\,s_z$. Die freie Energie dieses idealen Spinsystems ist

$$F\,(T,\,V,\,N,\,B) = U - T\,S - B\,\mathcal{M}\ ,$$

wobei $\mathcal{M}$ das magnetische Gesamtmoment (extensiv!) des Systems und $\mathcal{M}/V =: M\,(T,\,V,\,N,\,B)$ die Magnetisierung ist.

a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme.

b) Berechnen Sie die Magnetisierung $M\,(T,\,V,\,N,\,B)$ des Systems.

c) Betrachten Sie die Magnetisierung bei niedrigen und hohen Temperaturen und skizzieren Sie die Magnetisierung für verschiedene Temperaturen. Berechnen Sie $\chi_m = \dfrac{\partial M}{\partial B}$, die magnetische Suszeptibilität, insbesondere für $\dfrac{\mu_B\,B}{k_B\,T} \ll 1$.