

Moderne Theoretische Physik II (Quantenmechanik II und Statistik)

Institut für Theoretische Teilchenphysik

Prof. Dr. Matthias Steinhauser, Dr. Daniel Stremmer

WS 25/26 – Blatt 11

Abgabe: 30.01.2026, 11:30 Uhr; Besprechung: 03.02.2026

Aufgabe 1: (*) Mischung von idealen Gasen (2 + 2 = 4 Punkte)

Der Erwartungswert eines Operators O berechnet sich über

$$\langle O \rangle = \int \frac{d^{3N}p d^{3N}q}{(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{1}{N!} \rho O,$$

wobei ρ die Dichtematrix ist. Dabei wurde der Faktor $1/N!$ aufgrund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen eingeführt. Überzeugen Sie sich davon (vgl. Vorlesung), dass auf der Basis obiger Gleichung die Entropie eines idealen Gases gegeben ist durch

$$S = kN \log(V/N) + \dots,$$

wobei Terme, die hier nicht von Interesse sind, nicht explizit angegeben sind. Falls der Faktor $1/N!$ nicht vorhanden ist, erhält man für die Entropie

$$S_{\text{kl}} = kN \log(V) + \dots$$

Betrachten Sie nun ein isoliertes System, das in zwei gleich große Kammern mit Volumen V aufgeteilt ist. Diese sind durch eine Trennwand separiert. In jedem befindet sich ein ideales Gas. Die Trennwand wird nun entfernt, so dass eine quasistatische (aber irreversible) Durchmischung stattfindet. Berechnen Sie die Änderung der Entropie für folgende Fälle

- a) In beiden Kammern befinden sich unterschiedliche ideale Gase.

Solution

For distinguishable particles, the change of entropy is

$$\Delta S = S' - 2S = 2kN \log(2V/N) - 2kN \log(V/N) = 2kN \log(2),$$

and

$$\Delta S_{\text{kl}} = S' - 2S = 2kN \log(2V) - 2kN \log(V) = 2kN \log(2).$$

We see that $\Delta S = \Delta S_{\text{kl}}$, which implies that classically we actually treat particles to be distinguishable.

- b) In beiden Kammern befinden sich das gleiche ideale Gase.

Solution

For indistinguishable particles, the change of entropy is

$$\Delta S = S' - 2S = 2kN \log\left(\frac{2V}{2N}\right) - 2kN \log(V/N) = 0,$$

and

$$\Delta S_{\text{kl}} = S' - 2S = 2kN \log(2V) - 2kN \log(V) = 2kN \log(2).$$

We see that $\Delta S \neq \Delta S_{\text{kl}}$ for indistinguishable (identical) particles, and the classical entropy S_{kl} is not *extensive*, but the entropy S is a proper *extensive* quantity.

Verwenden Sie sowohl S als auch S_{kl} . Interpretieren Sie ihre Ergebnisse.

Aufgabe 2: (*) Ideales Gas (3 + 3 = 6 Punkte)

Das ideale Gas beschreibt ein System aus N identischen, nicht wechselwirkenden Teilchen in einem Volumen V . Wir unterscheiden zwischen zwei Arten von idealem Gas, dem Fermi- und Bose-Gas. Zusätzlich lässt sich ein nützliches mathematisches Modell definieren, das sogenannte Boltzmann-Gas oder ideale Gas.

- (a) Impuls und Position von klassischen Teilchen sind kontinuierlich und scharf messbar. Die kanonische Zustandssumme des Boltzmann-Gases hat die Form

$$Z_N \propto \int \frac{1}{N!} e^{-\beta H(x,p)} d^{3N}x d^{3N}p.$$

Führen Sie einen Parameter (bzw. ein Integral-Maß) h ein um die Zustandssumme dimensionslos zu machen. Zeigen Sie, dass gilt $Z_N = Z_1^N / N!$, wobei Z_1 die Zustandssumme von einem Teilchen ist und berechnen Z_N . Berechnen Sie daraus die Freie Energie und bestimmen Sie die Entropie. Zeigen Sie, dass die Entropie von der Wahl von h abhängt und finden Sie die neue Entropie wenn Sie h mit α reskalieren.

Solution

Since the particles are non-interacting, the Hamiltonian is simply the sum of the free single-particle Hamiltonians

$$H(x, p) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} \equiv \sum_i H_{\text{single}}(x_i, p_i),$$

where p_i is the momentum of the i -th particle. Using the integration measure h for $dx dp$ and the correct Gibb's factor $1/N!$, the N -particle partition function is therefore

$$Z_N = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d^{3N}x d^{3N}p e^{-\beta H(x,p)} = \frac{1}{N!} Z_{\text{single}}^N,$$

with the single-particle partition function Z_{single} . To evaluate this expression, we use the identity $\int dx x^2 e^{-cx^2} = (-1) \frac{d}{dc} \left(\int dx e^{-cx^2} \right)$ and the Gaussian integral $2 \int_0^\infty dx e^{-cx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}}$ for $c > 0$. Z_{single} is therefore equal to

$$Z_{\text{single}} = \frac{V}{h^3} \int d^3p e^{-\beta p^2/2m} = \frac{V}{\lambda^3}.$$

We defined here $\lambda = \sqrt{\frac{\beta h^2}{2\pi m}}$. This is the thermal de-Broglie wavelength if the 'correct' integration measure is used, i.e. Planck's constant.

Hence we find

$$Z_N = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N.$$

Using Stirling's formula $\log N! = N \log(N) - N + O(\log(N))$ we can calculate the thermodynamic potentials and from that the entropy and equation of state

$$F = -kT \log Z_N \approx -kTN \left(\log \frac{V}{N\lambda^3} + 1 \right),$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = kN \left(\log \frac{V}{N\lambda^3} + \frac{5}{2} \right),$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = \frac{NkT}{V}.$$

Note that both the entropy and free energy depend on the integration measure h which cannot be derived from classical physics. If we rescale h by α the new entropie is given by

$$S' = kN \left(\log \frac{V}{N\alpha^3 \lambda^3} + \frac{5}{2} \right) = S - 3kN \log \alpha$$

(b) Betrachten Sie nun ein quantenmechanisches System. Bestimmen Sie Z_N über

$$Z_N = \text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right] = \sum_n \langle \Phi_n | e^{-\beta E_n} | \Phi_n \rangle,$$

wobei H der Hamilton-Operator eines freien Teilchens ist und die Wellenfunktionen im Ortsraum gegeben sind durch

$$\langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \Phi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\theta \in S_N} (\pm 1)^\theta \phi_{\vec{p}_1}(\vec{x}_{\theta_1}) \dots \phi_{\vec{p}_N}(\vec{x}_{\theta_N}), \quad \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}},$$

mit $+, -$ für Bosonen und Fermionen. S_N ist die Menge aller möglichen Permutationen, die keinen neuen Zustand erzeugen. Zeigen Sie, dass der führende Term von Z_N im thermodynamischen Limes bei hohen Temperaturen mit dem klassischen Ergebnis aus (a) übereinstimmt. Benutzen Sie dafür das Maß $h = 2\pi\hbar$ für $dx dp$.

Hinweis: Die Summe in Z_N kann im thermodynamischen Limes durch ein Integral ersetzt werden:

$$\sum_n \rightarrow \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}p$$

Solution

In quantum mechanics, the momenta and energies of particles in a box with volume $V = L^3$ are quantized as

$$H|\Phi_n\rangle = E_n|\Phi_n\rangle, \quad E_n = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}, \quad \vec{p}_i = \frac{2\pi}{L} \hbar \vec{n}_i, \quad \vec{n}_i \in \mathbb{Z}^3,$$

$$\langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \Phi_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\theta \in S_N} (\pm 1)^\theta \phi_{\vec{p}_1}(\vec{x}_{\theta_1}) \dots \phi_{\vec{p}_N}(\vec{x}_{\theta_N}), \quad \phi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{e^{i\vec{p}\vec{x}/\hbar}}{\sqrt{V}},$$

with the $+, -$ sign for bosons and fermions, respectively, and S_N is the set of possible permutations that do not create any new states. In the thermodynamic limit $V \rightarrow \infty$, the momenta become continuous

$$\sum_n \rightarrow \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}p,$$

where the factor $1/N!$ takes into account that permutations of the momenta \vec{p}_i in Φ_n do not create any new states. Inserting $\mathbf{1} = \int d^{3N}x |\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N\rangle \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N|$ into the trace formula, we find the partition function

$$\begin{aligned} Z_N &= \text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right] = \sum_n \langle \Phi_n | e^{-\beta E_n} | \Phi_n \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}x d^{3N}p \langle \Phi_n | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N \rangle \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \Phi_n \rangle e^{-\beta E_n} \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}x d^{3N}p \frac{1}{N! V^N} \sum_{\theta, \theta'} (\pm 1)^{\theta+\theta'} e^{i\vec{p}_1(\vec{x}_{\theta_1} - \vec{x}_{\theta'_1})/\hbar} \dots e^{-\beta E_n} \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \right)^N \int d^{3N}x d^{3N}p \frac{1}{V^N} \sum_{\theta} (\pm 1)^\theta e^{i\vec{p}_1(\vec{x}_1 - \vec{x}_{\theta_1})/\hbar} \dots e^{-\beta E_n}. \end{aligned}$$

The integral over the momenta is a Gaussian integral

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta p^2/(2m) + i\vec{p}\vec{x}/\hbar} = \frac{1}{\lambda^3} e^{-\frac{\pi x^2}{\lambda^2}}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}},$$

with the thermal de-Broglie wavelength λ already introduced in exercise part (a). With this we find the partition function of the quantum gas

$$\begin{aligned} Z_N &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N \int \frac{d^{3N}x}{V^N} \sum_{\theta} (\pm 1) \left[e^{-\frac{\pi}{\lambda^2}(\vec{x}_1 - \vec{x}_{\theta_1})^2} \dots e^{-\frac{\pi}{\lambda^2}(\vec{x}_n - \vec{x}_{\theta_n})^2} \right] \\ &= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N \int \frac{d^{3N}x}{V^N} \left[1 \pm \sum_{i < j} e^{-\frac{2\pi}{\lambda^2}(\vec{x}_i - \vec{x}_j)^2} + (3 \text{ particle term}) + \dots \right], \end{aligned}$$

where we expanded the sum into the number of permuted particles. In the high temperature limit $T \rightarrow \infty$, the wavelength goes to zero $\lambda \rightarrow 0$ and only the first term is non-vanishing. More generally as long as $(\frac{V}{N})^{2/3} \sim \langle (\vec{x}_i - \vec{x}_j)^2 \rangle \gg \lambda^2$, i.e. at small densities, the leading term is

$$Z_N \approx \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N,$$

which coincides with the classical partition function of the Boltzmann gas for the integration measure $h = 2\pi\hbar$.

Aufgabe 3: Zustandsdichte

Wir betrachten ein quantenmechanisches Teilchen in einem D -dimensionalen Kasten der Kantenlänge L , für das die Energie-Impuls-Beziehung $\epsilon(p)$ besteht. Die Zustandsdichte $\mathcal{N}(\epsilon)$ ist definiert als

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int d^D p \delta(\epsilon - \epsilon(p)).$$

Es sei nun $\epsilon(|\vec{p}|) = \alpha|\vec{p}|^n$. Bestimmen Sie $\mathcal{N}(\epsilon)$ für $D = 1, 2, 3$. Geben Sie insbesondere die Ergebnisse für Elektronen ($\epsilon(p) = |\vec{p}|^2/(2m)$) und Photonen ($\epsilon(p) = c|\vec{p}|$) an.

Solution

We calculate first the state density for general D and $\epsilon(p) = \alpha p^n$

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\epsilon) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int d^D p \delta(\epsilon - \alpha p^n) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \int d\Omega_D \int_0^\infty dp p^{D-1} \delta(\epsilon - \alpha p^n) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} \int_0^\infty dp p^{D-1} \frac{1}{n\alpha p^{n-1}} \delta\left(p - \left(\frac{\epsilon}{\alpha}\right)^{1/n}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} \frac{1}{n\alpha} \left(\frac{\epsilon}{\alpha}\right)^{(D-n)/n}, \end{aligned}$$

where we used the result of exercise 4 on last sheet for the angular integration of the surface in D dimensions. From the delta distribution we only get one contribution due to the integration limits.

Therefore, we get the following state density for the electron

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^D} \frac{\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} 2m (2m\epsilon)^{(D-2)/2} = \frac{1}{\epsilon \Gamma(D/2)} \left(\frac{\epsilon m}{2\pi\hbar^2}\right)^{(D/2)},$$

which then leads to

$$\mathcal{N}^{D=3}(\epsilon) = \frac{m^{3/2}\sqrt{\epsilon}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}, \quad \mathcal{N}^{D=2}(\epsilon) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}, \quad \mathcal{N}^{D=1}(\epsilon) = \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2}\epsilon\pi\hbar}.$$

For the photon we get

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{2}{\epsilon \Gamma(D/2)} \left(\frac{\epsilon}{2c\hbar\sqrt{\pi}}\right)^D,$$

and

$$\mathcal{N}^{D=3}(\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2\pi^2(\hbar c)^3}, \quad \mathcal{N}^{D=2}(\epsilon) = \frac{\epsilon}{2\pi(\hbar c)^2}, \quad \mathcal{N}^{D=1}(\epsilon) = \frac{1}{\pi\hbar c}.$$