Karlsruher Institut für Technologie — Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 2016

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny, Dr. P. Schad

Blatt 4
Besprechung 13.05.2016

---

1. Maxwell-Verteilung: (30 Punkte, schriftlich)

In der Vorlesung wurde der folgende Ausdruck für die mikrokanonische Verteilungsfunktion postuliert:

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Sigma(E)dE}, & E < H(x) < E + dE; \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei x ein Punkt im Phasenraum ist. Im Limes $dE \to 0$ kann man $\rho(x)$ durch eine Delta-Funktion ausdrücken

$$\rho(x) \Rightarrow C_0 \delta(H(x) - E), \quad [C_0 = 1/\Sigma(E)].$$

Die Wahrscheinlichkeit dw, das System im Phasenvolumenelement dx zu finden, lautet dann

$$dw = \rho(x)dx.$$

Betrachten Sie das ideale Gas mit N Teilchen, Gesamtenergie E und Volumen V. Drücken Sie die Gesamtenergie $H[\{p_n\}, \{x_n\}]$ des Gases durch die Koordinaten und die Impulse der Teilchen aus. Die Wahrscheinlichkeit dw lautet nun

$$dw = C_0 \delta(H[\{p_n\}, \{x_n\}] - E) \prod_{n=1}^{N} d^3p_n d^3x_n \ .$$

Bestimmen Sie die 1-Teilchen-Verteilungsfunktion

$$\rho_1(x_1, p_1) \equiv \int \prod_{n=2}^{N} d^3p_n d^3x_n \, \rho(x)$$

und dadurch die 1-Teilchen-Impulsverteilung $f(p_1) = \int d^3x_1 \, \rho_1(x_1, p_1)$. Drücken Sie das Ergebnis durch die Energie pro Teilchen $\bar{\epsilon} = E/N$ aus. Vereinfachen Sie das Ergebnis im Limes $N \gg 1$. Die Normierungskonstante ist in dieser Übung nicht wichtig.

Hinweis: Für $N \gg 1$ gilt $\left(1 - \frac{x}{N}\right)^N \approx e^{-x}$. Die Maxwell-Verteilung ergibt sich aus der für das ideale Gas gültige Relation $\bar{\epsilon} = 3k_{\mathrm{B}}T/2$.

2. Dichtematrix für den Spin-1/2: (20 Punkte, schriftlich)

Für einen Spin-1/2 kann man die Dichtematrix durch den Polarisationsvector $\mathbf{P}$ ausdrücken:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right).$$

(a) Zeigen Sie, dass wenn $|\mathbf{P}| = 1$, dann ist der Spin in einem reinen Zustand, der mit der folgenden Wellenfunktion dargestellt werden kann:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ e^{i\phi}\sin\theta/2 \end{pmatrix}.$$

Die zwei Winkel legen die Richtung von $\mathbf{P}$ fest:

$$\mathbf{P} = |\mathbf{P}|(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta).$$

(b) Betrachten Sie jetzt ein System, das aus zwei Spin-1/2-Teilchen besteht. Berechnen Sie nun für alle vier Quantenzustände des Gesamtsystems $|S, S^z\rangle$, wobei $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$, die reduzierte Dichtematrix des Teilchens 1:

$$\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_2\hat{\rho} = \sum_{s_2^z}\langle s_2^z|\hat{\rho}|s_2^z\rangle,$$

wobei $\hat{\rho}$ die Dichtematrix des Gesamtsystems ist. In welchen der vier Zustände befindet sich das Teilchen 1 in einem reinen Zustand?
Hinweis: Die Dichtematrix des Gesamtsystems ist durch

$$\hat{\rho} = |S, S^z\rangle\langle S, S^z|$$

gegeben.

(c) Berechnen Sie für alle vier Zustände die von-Neumann-Entropie des Teilchens 1

$$S[\hat{\rho}_1] = -k_B \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1].$$

3. Mikrokanonisches Ensemble fur das ideale Boltzmann Gas: (50 Punkte, mündlich)

Gegeben sind N nicht-wechselwirkende klassische Teilchen in einem Volumen V im D-dimensionalen Raum. Wir nehmen an, dass die Teilchen keine internen Freiheitsgrade haben (einatomiges Gas). Das Ziel dieser Aufgabe ist die Untersuchung dieses idealen Gases mithilfe des mikrokanonischen Ensembles.

(a) Das System hat einen $2D \times N$-dimensionalen Phasenraum ($D \times N$ Teilchenkoordinaten und $D \times N$ Impulse). Entsprechend dem fundamentalen Postulat der klassischen Statistischen Mechanik im Gleichgewicht kann das System in jedem Punkt der $(2D \times N - 1)$-dimensionalen Hyperfläche konstanter Energie $E = \sum_{i=1}^{N} p_i^2/2m = const$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit gefunden werden. Finde einen expliziten Ausdruck für die normierte Gleichgewichtsverteilung ρ des Systems im Phasenraum.
Hinweis: Die Gasteilchen sind ununterscheidbar.

(b) In der statistischen Physik ist die Entropie durch die Wahrscheinlichkeitsverteilung ρ entsprechend

$$S = -k_B \langle \ln \rho \rangle \tag{1}$$

definiert. Finde die Entropie $S(E, V, N)$ des idealen Boltzmanngases als Funktion der Energie E, der Teilchenzahl N und des Volumens V des Systems. Betrachte den makroskopischen Grenzwert $N \gg 1$.

Hinweis: Bei der Betrachtung des makroskopischen Limits wird eventuell der asymptotische Ausdruck der Eulerschen Gamma-Funktion benötigt

$$\ln \Gamma(n) \approx n \ln n - n, \qquad n \gg 1, \tag{2}$$

die auf Blatt 1 hergeleitet wurde.

(c) Leite Ausdrücke für die Temperatur T, den Druck p und das chemische Potential μ des Boltzmanngases als Funktion von E, V und N her und benutze dabei die thermodynamischen Grundgleichungen und die Entropie $S(E, V, N)$, die in Aufgabe 1 b) hergeleitet wurde. Drücke danach p und μ als Funktionen von T, V und N aus.

(d) Finde die Entropie des Systems als Funktion von T, V und N. Vergleiche die Ergebnisse mit den Resultaten aus Aufgabe 2 von Blatt 1 (die Raumdimension D war in dieser Aufgabe 3). Diskutiere die Anwendbarkeit des dritten Hauptsatzes der Thermodynamik auf das Boltzmanngas.