Moderne Theoretische Physik III (Theorie F – Statistische Mechanik) SS 17

Prof. Dr. Alexander Mirlin **Blatt 4**

PD Dr. Igor Gornyi, Janina Klier **Besprechung: 19.05.2017**

---

1. Teilchen mit f Freiheitsgraden: (8+12=20 Punkte)

Für ein ideales Gas aus N klassischen Teilchen (Molekülen) mit f Freiheitsgraden pro Molekül gilt:

$$U = \frac{f}{2} N k_B T, \quad pV = N k_B T. \tag{1}$$

(a) Betrachten Sie eine *adiabatische* Zustandsänderung bei konstanter Teilchenzahl, und zeigen Sie über den 1. Hauptsatz, dass gilt:

$$pV^{(f+2)/f} = \text{const.}, \quad VT^{f/2} = \text{const.}$$

(b) Ausgehend von Gl. (1), berechnen Sie die Entropie

$$S(U,V,N) = S_0 \frac{N}{N_0} + N k_B \left[\frac{f}{2} \ln\left(\frac{U}{U_0}\right) + \ln\left(\frac{V}{V_0}\right) - \frac{f+2}{2} \ln\left(\frac{N}{N_0}\right) \right]$$

wobei S_0, U_0, V_0, N_0 Integrationskonstanten sind. Diskutieren Sie den 3. Hauptsatz der Thermodynamik für ein ideales Gas.

Hinweis. Zeigen Sie zunächst: $T\mathrm{d}s = \mathrm{d}u + p\mathrm{d}v$ mit $s = S/N$, $u = U/N$, $v = V/N$.

2. Gas in Bewegung: (6+6+8+10=30 Punkte)

Betrachten Sie ein System von N klassischen nicht-wechselwirkenden Teilchen im D-dimensionalen Raum. Die Teilchen haben keine internen Freiheitsgrade. Nehmen Sie an, dass der Gesamtimpuls $\vec{P} = \sum_i \vec{p}_i$ erhalten bleibt.

(a) Betrachten Sie eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{x}, t)$, wobei $\vec{x} = (\vec{q}, \vec{p})$ für einen vollen Satz von Koordinaten und Impulsen im Phasenraum steht. Zeigen Sie, dass jede Funktion im Phasenraum, die die Form

$$\rho(\vec{x}) = \rho(H(\vec{x}), \vec{P}(\vec{x}))$$

hat, eine stationäre Lösung der Liouville-Gleichung mit der Hamilton-Funktion $H(\vec{x})$ ist.

(b) Wir verallgemeinern nun das fundamentale Postulat der klassischen Statistischen Mechanik indem wir postulieren, dass die Gleichgewichtsverteilung eine uniforme Verteilung über die Hyperfläche im Phasenraum ist, die durch konstante Energie E und konstanten Impuls $\vec{P}$ beschrieben wird. Finden Sie einen expliziten Ausdruck für die *normierte* Gleichgewichtsverteilung $\rho(\vec{x})$ des Systems für $D = 1$.

Hinweis. Ein System mit endlichem Volumen bei gleichzeitig erhaltener Translationsinvarianz kann durch Teilchen auf einem Kreis mit Umfang L modelliert werden. Für den Normierungsfaktor ist es ausreichend nur die Gesamtenergie- und Gesamtimpulsabhängigkeit zu bestimmen. Für die explizite Berechnung des Integrals erhalten Sie 5 Bonuspunkte.

(c) Bestimmen Sie nun die 1-Teilchen-Verteilungsfunktion

$$\rho_1(q_1, p_1) = \int \prod_{i=2}^{N} dp_i dq_i \, \rho(\vec{x}) \tag{2}$$

und dadurch die 1-Teilchen-Geschwindigkeitsverteilung $f(v)$. Drücken Sie das Ergebnis für $f(v)$ durch die Energie pro Teilchen $\bar{\epsilon} = E/N$ aus.

(d) Finden Sie im Limes $N \gg 1$ die wahrscheinlichste Geschwindigkeit v^*, die durch

$$\left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{v=v^*} = 0$$

definiert ist, die mittlere Geschwindigkeit $\langle v \rangle$ und die Kumulante $\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2$.

3. Dichtematrix für den Spin-1/2: (6+14=20 Punkte)

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

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(1 + \hat{\mathbf{P}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right). \tag{3}$$

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

$$\Psi = \begin{pmatrix} \cos\theta/2 \\ e^{i\phi}\sin\theta/2 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

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 nun ein System, das aus zwei Spin-1/2-Teilchen besteht. Berechnen Sie 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:

$$\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_2\hat{\rho} = \sum_{s_2^z} \langle s_2^z|\hat{\rho}|s_2^z\rangle. \tag{5}$$

Die Dichtematrix $\hat{\rho}$ des Gesamtsystems ist durch

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

gegeben. In welchen der vier Zustände befindet sich das Teilchen 1 in einem reinen Zustand? Berechnen Sie $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \ln \hat{\rho}_1]$ für alle vier Zustände.