

## Übungen zur Statistischen Thermodynamik

### Aufgabe 4 (Entropie)

Gegeben seien  $N$  unabhängige harmonische Oszillatoren, deren quantenmechanischer Zustand durch die Besetzungszahlen  $n_1, \dots, n_N$  gekennzeichnet wird. Die Gesamtenergie beträgt somit

$$E = \frac{N}{2}\hbar\omega + M\hbar\omega$$

mit  $M \equiv n_1 + \dots + n_N$ . Zeigen Sie, daß die Zahl der Zustände mit dieser Energie durch

$$\Gamma(N, M) = \frac{(N + M - 1)!}{M!(N - 1)!}$$

gegeben ist, wobei angenommen wurde, daß die Oszillatoren unterscheidbar sind. Betrachten Sie nun den Grenzfall  $M \gg 1$ ,  $N \gg 1$  und berechnen Sie

$$\frac{1}{T} = \frac{d}{dE} \ln \Gamma(N, M)$$

als Funktion der Energie  $E$  und der Grundzustandsenergie  $E_0 = N\hbar\omega/2$ .

### Aufgabe 5 (Phasenraumvolumen)

Betrachten Sie  $N$  (unterscheidbare) Punktteilchen der Masse  $m$ , die im Volumen  $V$  eingeschlossen sind und nicht miteinander wechselwirken. Zeigen Sie, daß die Zahl der Zustände, deren Energie kleiner als  $E$  ist, durch

$$\frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \cdot \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)}$$

gegeben ist.

### Aufgabe 6 (Liouville-Gleichung)

Betrachten Sie ein System von klassischen Teilchen mit insgesamt  $f$  Freiheitsgraden. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  seien die Teilchen gemäß der Dichte  $\rho_0(\vec{q}, \vec{p})$  im Phasenraum verteilt, wobei  $\vec{q}, \vec{p}$  die  $f$ -dimensionalen (generalisierten) Koordinaten des Systems sind. Zu einem späteren Zeitpunkt  $t > 0$  hat sich die Phasenraumverteilung zu

$$\rho(\vec{q}, \vec{p}, t) = \int d^f q_0 \int d^f p_0 \rho_0(\vec{q}_0, \vec{p}_0) \delta(\vec{q} - \vec{Q}(\vec{p}_0, \vec{q}_0, t)) \delta(\vec{p} - \vec{P}(\vec{p}_0, \vec{q}_0, t))$$

entwickelt, wobei  $\vec{Q}(\vec{q}_0, \vec{p}_0, t)$  und  $\vec{P}(\vec{q}_0, \vec{p}_0, t)$  die Lösungen der Hamilton'schen Gleichungen  $\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i$  und  $\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i$  zu den Anfangsbedingungen  $\vec{q}(0) = \vec{q}_0$  und  $\vec{p}(0) = \vec{p}_0$  sind.

Leiten sie aus obigem Ausdruck die Liouville-Gleichung für die Phasenraumdichte  $\rho(\vec{q}, \vec{p}, t)$  ab,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_{i=1}^f \left( \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \rho}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \right) = \{\rho, H\}.$$

### Aufgabe 7 (Scharmittel)

Gegeben sein ein eindimensionaler harmonischer Oszillator mit der Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2.$$

- a. Geben Sie die Trajektorie im Phasenraum als Funktion der Energie  $E$  an. Berechnen Sie den Zeitmittelwert

$$\overline{x^2} = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} d\tau x(\tau)^2,$$

wobei  $T$  die Periodendauer des Oszillators und  $x(t)$  seine Bahnkurve ist. Was ergibt sich im Grenzfall  $T \rightarrow \infty$ ?

- b. Betrachten Sie nun eine sehr große Zahl identischer Oszillatoren, die im Phasenraum gemäß der Dichte

$$\rho(x, p) = N^{-1} \delta(H(x, p) - E), \quad \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} \rho(x, p) = 1$$

auf der Energieschale verteilt sind. Bestimmen Sie die Normierungskonstante  $N$  als Vielfaches von  $\hbar\omega$  und berechnen Sie den Scharmittelwert

$$\langle x^2 \rangle = \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} x^2 \rho(x, p).$$

Gilt Scharmittel gleich Zeitmittel?

# Besprechung: Blatt 2, Theo 5 vom Mittwoch, den 2.10.2011

## Aufgabe 4

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{N}{2}\hbar\omega + M\hbar\omega = \hbar\omega\left(\frac{N}{2} + M\right), \quad N + M = \frac{N}{2} + \frac{M}{2} + M = \frac{E}{\hbar\omega} + \frac{N}{2} = \frac{E}{\hbar\omega} + \frac{E_0}{\hbar\omega} \\
 M &= \frac{E-E_0}{\hbar\omega}, \quad N = \frac{2E_0}{\hbar\omega} \\
 \Gamma(N, M) &= \frac{(M+N-1)!}{M!(N-1)!} \approx \frac{(M+N)!}{M!N!} \\
 \ln(N!) &\approx N(\ln(N) - 1) \\
 \ln(\Gamma(N, M)) &= \ln((N+M)!) - \ln(M!) + \ln(N!) \\
 &= (N+M)(\ln(M+N) - 1) - M\ln(M-1) - N(\ln(N) - 1) \\
 &= (M+N)\ln(M+N) - M - N - M\ln(M) + N = (M+N)\ln(M+N) - M - M\ln(M) \\
 &= (M+N)\ln(M+N) - M\ln(M) - N\ln(N) = \frac{E+E_0}{\hbar\omega} \ln\left(\frac{E+E_0}{\hbar\omega}\right) - \frac{E-E_0}{\hbar\omega} \ln\left(\frac{E-E_0}{\hbar\omega}\right) - \frac{2E_0}{\hbar\omega} \ln\left(\frac{2E_0}{\hbar\omega}\right) \\
 &= \frac{E+E_0}{\hbar\omega} \ln(E-E_0) - \frac{E+E_0}{\hbar\omega} \ln(\hbar\omega) - \frac{E-E_0}{\hbar\omega} \ln(E-E_0) + \frac{E-E_0}{\hbar\omega} \ln(\hbar\omega) - \frac{2E_0}{\hbar\omega} \ln(2E_0) + \frac{2E_0}{\hbar\omega} \ln(\hbar\omega) \\
 &= \frac{E+E_0}{\hbar\omega} \ln(E-E_0) - \frac{E-E_0}{\hbar\omega} \ln(E-E_0) - \frac{2E_0}{\hbar\omega} \ln(2E_0) \\
 \partial_t \Gamma(E, E_0) &= \frac{\ln(E+E_0)}{\hbar\omega} + \frac{\frac{E+E_0}{\hbar\omega}}{E+E_0} - \frac{\ln(E-E_0)}{\hbar\omega} + \frac{\frac{E-E_0}{\hbar\omega}}{E-E_0} \\
 &= \frac{1}{\hbar\omega} (\ln(E+E_0) - \ln(E-E_0)) = kT^{-1}
 \end{aligned}$$

## Aufgabe 2

$$\begin{aligned}
 N \text{ Teilchen in } V: H &= \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} \\
 \text{ununterscheidbar} &\Rightarrow \text{Faktor } \frac{1}{N!} \\
 \Sigma(E) &= \frac{1}{N!} \int_{H < E} d\Gamma = \frac{1}{N!} \int_E d\Gamma \theta(E - H) \\
 \int d\Gamma &= \int \prod_{i=1}^{3N} \frac{dp_i dq_i}{2\pi\hbar} = V^N \int \prod_{i=1}^{3N} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \\
 \Rightarrow \Sigma(E) &= \frac{1}{N!} V^N \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{3N} dp_i \theta\left(1 - \sum_{n=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2mE}\right)}_{n\text{-dim Volumeneiner Kugel}} \\
 \text{Geschweifte Klammer mit Radius } r &= \sqrt{2mE} \text{ ist } \int \dots = r^{3N} \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{\Gamma(\frac{3N}{2} + 1)} \\
 \Rightarrow \Sigma(E) &= \frac{V^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{\sqrt{2mE}^3 \pi^{\frac{3}{2}}}{\Gamma(\frac{3N}{2} + 1)}
 \end{aligned}$$

## Aufgabe 6

$$\begin{aligned}
 \partial_t \rho &= \partial_t \int d^f q_0 \int d^f p_0 \rho_0(\vec{q}_0, \vec{p}_0) \delta(\vec{q} - \vec{Q}(\vec{p}_0, \vec{q}_0, t)) \delta(\vec{p} - \vec{P}(\vec{p}_0, \vec{q}_0, t)) \\
 &= \partial_t \int d^f q_0 \int d^f p_0 \rho_0(\vec{q}_0, \vec{p}_0) (\delta'(\vec{q} - \vec{Q}(\vec{p}_0, \vec{q}_0, t)) \dot{\vec{Q}} \delta(\vec{p} - \vec{P}(\vec{p}_0, \vec{q}_0, t)) \\
 &\quad + \delta(\vec{q} - \vec{Q}(\vec{p}_0, \vec{q}_0, t)) \dot{\vec{P}} \delta'(\vec{p} - \vec{P}(\vec{p}_0, \vec{q}_0, t))) \\
 &= \int \int \rho_0 \delta'(q - Q) \dot{Q} \delta(p - P) + \int \int \rho_0 \delta(q - Q) \dot{P} \delta(p - P) \quad (\text{Kurzschreibweise})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\delta'(q - Q) &= \partial_q \delta(q - Q) \\
\Rightarrow \dots &= \int \int \rho_0 \partial_q \delta(q - Q) \partial_P H \delta(p - P) - \int \int \rho_0 \partial_p \delta(p - P) \partial_Q H \delta(q - Q) \\
&= \partial_q \int \int \dots - \partial_p \int \int \dots = \sum \partial_{q_i} \rho \partial_{p_i} H - \partial_{p_i} \rho \partial_{q_i} H
\end{aligned}$$

## Aufgabe 7

a)  $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{mw^2}{2}x^2 \Rightarrow E \sim, \Rightarrow \text{Ellipse (Bewegungsgleichung!)}$

$$\begin{aligned}
\bar{x}^2 &= \frac{1}{T} \int_t^{t+T} d\tau x(\tau)^2, \quad x(t) = x_0 \cos(wt) + \frac{p_0}{\sqrt{mw}} \sin(wt) \\
&= \frac{1}{T} \int_t^{t+T} d\tau x_0^2 \cos^2(w\tau) + \frac{p_0^2}{mw^2} \sin^2(wt) \quad (\sin() \cos() = 0 \text{ für Integral über Periode!}) \\
&= \frac{1}{T} \left( \int_t^{t+T} d\tau x_0^2 \cos^2(w\tau) + \int_t^{t+T} d\tau \frac{p_0^2}{mw^2} \sin^2(wt) \right) = \frac{1}{2T} (x_0^2 + \frac{p_0^2}{mw^2}) T = \frac{1}{2} (x_0^2 + \frac{p_0^2}{mw^2}) \\
&\Rightarrow \text{zeitunabhängig, identisch für alle } T!
\end{aligned}$$

b)  $1 = \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} \frac{1}{N} \delta(H - E) = \frac{1}{N} \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} \delta(\frac{p^2}{2m} + \frac{mw^2 x^2}{2} - E)$

Substitution:  $x' = \sqrt{\frac{m}{2}}wx, \quad p' = \frac{p}{\sqrt{2m}}$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow N &= \frac{1}{w\pi\hbar} \int dp' dx' \delta(p'^2 + x'^2 - E) = \frac{1}{w\pi\hbar} \int d\varphi dr r \delta(r^2 - E) \\
&= \frac{1}{w\hbar} \int dr \frac{r}{2r} (\delta(r - \sqrt{E}) + \underbrace{\delta(r + \sqrt{E})}_{=0}) = \frac{1}{\hbar w}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int \frac{dx dp}{2\pi\hbar} x^2 \varrho(x, p) = \frac{\hbar w}{2\pi\hbar} \int dx dp x^2 \delta(\frac{p^2}{2m} + \frac{mw^2 x^2}{2} - E) \\
&= \frac{w\hbar}{2\pi\hbar} \frac{2}{w} \frac{2}{mw^2} \int dx' dp' x'^2 \delta(x'^2 + p'^2 - E) = \frac{2}{\pi mw^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty dr r r^2 \cos^2(\varphi) \delta(r^2 - E) = \frac{E}{mw^2}
\end{aligned}$$

$\Rightarrow \text{Scharmittel} = \text{Zeitmittel}$