

Blatt 7

Aufgabe 20

Für ein Gas für Translationsfreiheitsgraden allein gilt

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \sum_{i,j} U(\vec{x}_i - \vec{x}_j)$$

a) Die Impulsintegration kann wie üblich durchgeführt werden,

$$\begin{aligned} Z_N(T, V) &= \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^{3N} p \int_V d^{3N} x e^{-\beta H} = \\ &= \frac{1}{h^{3N} N!} \int d^3 p_1 \dots d^3 p_N e^{-\beta \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m}} \int_V d^3 x_1 \dots d^3 x_N e^{-\beta \sum U(\vec{x}_i - \vec{x}_j)} = \\ &= \underbrace{\frac{1}{h^{3N} N!} \left[\frac{2m\bar{u}}{\beta} \right]^{3N/2}}_{\frac{1}{N! \lambda_T^{3N}}} \int_V d^3 x_1 \dots d^3 x_N e^{-\beta \sum U(\vec{x}_i - \vec{x}_j)} \end{aligned}$$

b) Das großkanonische Potential:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z} = -k_B T \ln \mathcal{Z}.$$

Außerdem gilt:

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \left[\sum_{\ell} \xi^{\ell} Z_{\ell}(T, V) \right] = \ln \left[1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} \xi^{\ell} Z_{\ell}(T, V) \right].$$

Wir entwickeln jetzt $\ln \mathcal{Z}$ um $\xi=0$. Mit $\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{x^n}{n}$,

bekommen wir:

$$\begin{aligned} \ln \mathcal{Z} &= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \left(\sum_{\ell=1}^{\infty} \xi^{\ell} Z_{\ell} \right)^n = \sum_{\ell=1}^{\infty} \xi^{\ell} Z_{\ell} - \frac{1}{2} \left(\sum_{\ell=1}^{\infty} \xi^{\ell} Z_{\ell} \right)^2 + \dots = \\ &= \xi Z_1 + \xi^2 Z_2 - \frac{1}{2} \xi^2 Z_1^2 + O(\xi^3) = \xi \cdot Z_1 + \xi^2 \cdot \left(Z_2 - \frac{1}{2} Z_1^2 \right) + O(\xi^3). \end{aligned}$$

Einsetzen in Ω liefert:

$$\Omega(T, V, \xi) = -k_B T \cdot \left[\xi \rho_1(T, V) + \xi^2 \rho_2(T, V) \right] + O(\xi^3),$$

$$\text{mit } \rho_1 = Z_1, \quad \rho_2 = Z_2 - \frac{1}{2} Z_1^2.$$

Für das ideale Gas gilt:

$$\Omega_0(T, V, \xi) = -k_B T \cdot \frac{V}{\lambda_T^3} \cdot \xi$$

Da wir uns für Abweichungen aus dem idealen Gas interessieren faktorisieren wir diesen Term aus

$$\Omega(T, V, \xi) = -k_B T \cdot \frac{V}{\lambda_T^3} \cdot \left[\xi \cdot b_1(T, V) + \xi^2 b_2(T, V) + \dots \right]$$

$$\text{mit } \begin{cases} b_1(T, V) = \frac{\lambda_T^3}{V} \cdot Z_1(T, V) \end{cases}$$

$$\begin{cases} b_2(T, V) = \frac{\lambda_T^3}{V} \cdot \left[Z_2(T, V) - \frac{1}{2} Z_1^2(T, V) \right] \end{cases}$$

$$c) \quad b_1(T, V) = \frac{\lambda_T^3}{V} Z_1(T, V) = \frac{\lambda_T^3}{V} \cdot \frac{1}{\lambda_T^3} \cdot \underbrace{\int_V d^3x e^{-\beta \cdot 0}}_V = 1 \quad (\text{immer})$$

$$b_2(T, V) = \frac{\lambda_T^3}{V} \left[Z_2(T, V) - \frac{1}{2} Z_1^2(T, V) \right] = \frac{\lambda_T^3}{V} \cdot Z_2(T, V) - \frac{V}{2 \lambda_T^3}$$

Es ist einfach zu überprüfen, dass $b_2 = 0$ für das ideale Gas

d) Die mittlere Teilchenzahl kommt aus

$$\langle N \rangle = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = - \frac{\partial \Omega}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial \mu} = - \beta \xi \frac{\partial \Omega}{\partial \xi}$$

Mit dem gefundenen Ausdruck für Ω bekommen wir

$$\langle N \rangle = - \beta \xi \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left[-k_B T \cdot \frac{V}{\lambda_T^3} \cdot \sum_{j=1}^{\infty} \xi^j b_j(T, V) \right] \right] = \frac{V}{\lambda_T^3} \cdot \sum_{j=1}^{\infty} j \xi^{j-1} b_j(T, V)$$

$$\text{Die mittlere Teilchendichte: } n = \frac{\langle N \rangle}{V} = \frac{1}{\lambda_T^3} \cdot \sum_{j=1}^{\infty} j \xi^{j-1} b_j(T, V)$$

Wenn $\xi \rightarrow 0$, geht auch $n \rightarrow 0$, also lösen wir die Gleichung nach ξ :

$$n \lambda_T^3 = \xi \cdot b_1(T, V) + 2 \xi^2 b_2(T, V) + O(\xi^3)$$

$$\Rightarrow 2\zeta^2 b_2 + \zeta - m\lambda_T^3 = 0$$

$$\Rightarrow \zeta = \frac{1}{4b_2} \left[-1 + \sqrt{1 + 8b_2 m \lambda_T^3} \right] = \frac{1}{4b_2} \left[\cancel{-1} + \cancel{1} + \frac{1}{2} \cdot 8 m \lambda_T^3 \cdot b_2 - \frac{1}{8} (8 m \lambda_T^3 \cdot b_2)^2 + \dots \right]$$

$$\Rightarrow \zeta = m \lambda_T^3 - 2 m^2 \lambda_T^6 \cdot b_2 + O(n^3)$$

e) Der Druck ist gegeben durch $p = -\frac{\partial \Omega}{\partial V}$. Im Allgemeinen, für homogene Systeme (also die, die $\Omega(T, \lambda V, \mu) = \lambda \Omega(T, V, \mu)$ erfüllen) gilt $\Omega = -pV$. Da aber V die einzige extensive Variable ist, muss auch gelten

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\Omega(T, V, \mu)}{V} = \text{Konst} = - \lim_{V \rightarrow \infty} p(T, V, \mu).$$

Es gilt dann (mit b), c) und d)):

$$\lim_{V \rightarrow \infty} p(T, V, \mu) = - \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\Omega(T, V, \mu)}{V} = \frac{k_B T}{\lambda_T^3} \left[\zeta b_1(T, V \rightarrow \infty) + \zeta^2 b_2(T, V \rightarrow \infty) \right]$$

Setzen wir nun für ζ die oben hergeleitete Formel ein, dann folgt (lim weggelassen):

$$p = \frac{k_B T}{\lambda_T^3} \left[m \lambda_T^3 (1 - 2m \lambda_T^3 b_2) + m^2 \lambda_T^6 (1 - 2m \lambda_T^3 b_2)^2 b_2 \right]$$

$$\Rightarrow \frac{p}{k_B T} = m (1 - 2m \lambda_T^3 b_2 + m \lambda_T^3 b_2) + O(n^3) =$$

$$= m \left\{ 1 - m \cdot \lambda_T^3 \cdot \frac{\lambda_T^3}{V} \cdot \left[Z_2(T, V) - \frac{1}{2} Z_1(T, V) \right] \right\} + O(n^3)$$

$$\Rightarrow \frac{p}{k_B T} = m \left\{ 1 + m' B(T) + O(n^2) \right\}, \quad B(T) = -\lambda_T^6 \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \left[Z_2(T, V) - \frac{1}{2} Z_1(T, V) \right]$$

Aufgabe 21

a) Die Minimale-Substitution-Vorschrift liefert

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A})^2$$

Für ein konstantes Magnetfeld können wir schreiben $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{x}$,
dann

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{p}^2 + \frac{q^2}{c^2} \cdot \frac{1}{4} (\vec{B} \times \vec{x})^2 - \frac{q}{2c} [\vec{p}(\vec{B} \times \vec{x}) + (\vec{B} \times \vec{x}) \cdot \vec{p}] \right\} =$$

$$\stackrel{*}{=} \frac{1}{2m} \left\{ \vec{p}^2 + \frac{q^2}{4c^2} (\vec{B} \times \vec{x})^2 - \frac{q}{2c} [\vec{B} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}) + (\vec{x} \times \vec{p}) \cdot \vec{B}] \right\} =$$

$$\stackrel{**}{=} \frac{1}{2m} \left\{ \vec{p}^2 + \frac{q^2}{4c^2} (\vec{B} \times \vec{x})^2 - \frac{q}{2} \vec{B} \cdot \vec{L} \right\} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{q^2 \vec{B}^2}{8mc^2} [\vec{x}^2 - (\hat{e}_z \cdot \vec{x})^2] - \frac{qB}{2mc} \hat{n} \cdot \vec{L}$$

hier wir $\vec{B} = \hat{e}_z B$ eingesetzt haben, weiter haben wir

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \rho^2 - \omega L_z, \quad \omega = \frac{qB}{2mc}, \quad \rho^2 = \vec{x}^2 - (\hat{e}_z \cdot \vec{x})^2 = x^2 + y^2$$

* wegen Vektorprodukt gilt zyklische Invarianz.

** \vec{B} ist konstanter Vektor, vertauscht mit allem.

b) Angegeben ist $E(k, m, l) = \frac{\hbar^2 k^2 \pi^2}{2m\Lambda^2} + 2\hbar\omega \left[m + \frac{1}{2} + \frac{|l|+l}{2} \right], \quad k \in \mathbb{Z}, m \in \mathbb{N},$
 $l \in \mathbb{Z}, l \geq -1$

Die kanonische Zustandssumme eines einzelnen Teilchen lautet:

$$Z = \sum_{k, l, m} e^{-\beta E(k, m, l)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2 \pi^2}{2m\Lambda^2}} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-2\beta \hbar \omega m} \sum_l e^{-\beta \hbar \omega (|l|+l)} \cdot e^{-\beta \hbar \omega}$$

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\Lambda^2} k^2} \approx \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\Lambda^2} k^2} = \sqrt{\frac{\hbar \cdot 2m\Lambda^2}{\beta \hbar^2 \pi^2}} = \frac{\Lambda}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\beta \pi}}$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} e^{-2\beta \hbar \omega m} = \frac{1}{1 - e^{-2\beta \hbar \omega}}$$

$$\sum_l e^{-\beta \hbar \omega (|l|+l)} = \sum_{l=0}^{\infty} e^{-2\beta \hbar \omega l} + \sum_{l=-1}^{-1} 1 = 1 + \frac{1}{1 - e^{-2\beta \hbar \omega}}$$

Dann bekommen wir:

$$Z = e^{-\beta \hbar \omega} \cdot \underbrace{\frac{1}{1 - e^{-2\beta \hbar \omega}}}_{\frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar \omega)}} \cdot \frac{\Lambda}{\hbar} \cdot \sqrt{\frac{2m}{\pi \hbar}} \cdot \underbrace{\left[1 + \frac{1}{1 - e^{-2\beta \hbar \omega}} \right]}_{1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2 \tanh(\beta \hbar \omega)}} =$$

$$\Rightarrow Z = \frac{1}{4 \sinh(\beta \hbar \omega)} \cdot \frac{\Lambda}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\pi \hbar}} \cdot \left[2 + 1 + \frac{1}{\tanh(\beta \hbar \omega)} \right]$$

Die großkanonische Zustandssumme (die Teilchen wechselwirken nicht miteinander)

$$\mathcal{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} e^{\beta \mu N} \cdot Z^N = \exp \{ Z \cdot e^{\beta \mu} \}$$

und das großkanonische Potential:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z} = -\frac{1}{\beta} \cdot Z \cdot e^{\beta \mu} = -\frac{\Lambda e^{\beta \mu}}{4 \hbar \beta} \cdot \sqrt{\frac{2m}{\pi \hbar}} \cdot \frac{1}{\sinh(\beta \hbar \omega)} \left[2 + 1 + \frac{1}{\tanh(\beta \hbar \omega)} \right]$$