
Theoretische Physik IV (Statistische Physik)

Prof. Dr. Albrecht Klemm
Christoph Nega, Fabian Fischbach

Abgabe: Fr. 03.11.2017 (in der Vorlesung)

<http://www.th.physik.uni-bonn.de/klemm/statphyws1718/index.php>

–INFORMATION–

Am Reformationstag (Dienstag, den 31. Oktober 2017) findet keine Vorlesung statt. Die Übungen am Dienstag und Mittwoch fallen aus. Die Hausaufgaben werden am darauffolgenden Freitag abgegeben.

–HAUSAUFGABEN–

H.3.1 Das Mikrokanonische Ensemble (7 Punkte)

Hier möchten wir einige Schritte in der klassischen Berechnung von $\Omega(E)$ wiederholen. Diese Größe gibt an, wie viele Zustände mit der Energie E in einem gegebenen System existieren.

- a) Zeigen Sie zunächst, dass für die Delta-Distribution

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) \delta(f(x)) dx = \sum_n \frac{\phi(x_n)}{|f'(x_n)|} \quad (1)$$

gilt, wobei x_n eine Nullstelle der Funktion¹ $f(x)$ ist. Die Summe in (1) erstreckt sich also über alle Nullstellen von $f(x)$.

(1 Punkt)

- b) Betrachten Sie die Hamiltonfunktion $H(q, p)$, wobei q und p zwei $3N$ -dimensionale Koordinaten des $6N$ -dimensionalen Phasenraums sind. Eine Äquienergiefläche² hierin ist dann gegeben durch $H(q, p) = E = \text{konst.}$. Entwickeln Sie die Funktion $H(q, p)$ senkrecht zu ihrer Äquienergiefläche.

Hinweis: Benutzen Sie die mehrdimensionale Taylorentwicklung. Des Weiteren überlegen Sie sich, warum der Gradient in die Richtung der größten Änderung einer Funktion zeigt.

(1 Punkt)

- c) Berechnen Sie mit Hilfe der obigen Überlegungen $\Omega(E)$ aus

$$\Omega(E) = \int \frac{dq dp}{h^{3N} N!} \delta(E - H(q, p)) . \quad (2)$$

Hinweis: Vergleichen Sie mit Schwabl (2.2.4) und (2.2.4').

(1 Punkt)

¹Die Funktion muss hierfür stetig differenzierbar und die Nullstellen einfach sein.

²Dies ist eine $6N - 1$ -dimensionale Hyperfläche und wir nutzen eine sprachliche Analogie zur Äquipotentialfläche der Elektrodynamik.

Nun möchten wir anhand des eindimensionalen harmonischen Oszillators unsere Überlegung zur Äquienergiefläche illustrieren (es sei $N = 1$). Betrachten Sie die Hamiltonfunktion

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega q^2 . \quad (3)$$

- d) Bestimmen Sie die Geometrie einer Äquienergiefläche, hier also einer Phasenbahn des harmonischen Oszillators.

Hinweis: Anstatt die Bewegungsgleichungen zu lösen, können Sie auch $H(q, p) = E = \text{konst.}$ betrachten.

(3 Punkte)

- e) Konstruieren Sie in jedem Punkt der Phasenbahn eine orthogonale Basis, wobei ein Basisvektor senkrecht zur Äquienergiefläche $H(q, p) = E = \text{konst.}$ stehen soll.

(1 Punkt)

H.3.2 Volumen und Oberfläche der d -dim. Kugel (4 Punkte)

In dieser Aufgabe möchten wir die d -dimensionale Kugel analysieren. Eine ähnliche Betrachtung ist auch zur Berechnung des idealen Gases nützlich.

Berechnen Sie sowohl das Volumen als auch die Oberfläche einer d -dimensionalen Kugel mit Radius R .

Hinweis: Beginnen Sie zunächst mit dem d -dimensionalen Gaussintegral

$$I_d := \int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^d (x_k)^2} d^d x . \quad (4)$$

Hierfür verwenden Sie verallgemeinerte Kugelkoordinaten. Außerdem ist die Integraldarstellung der Gammafunktion aus A.2.1 nützlich (per Definition ist $\Gamma(z) = \int_0^\infty x^{z-1} e^{-x} dx$).

H.3.3 Mikrokanonisches Ensemble quantenmechanischer harmonischer Oszillatoren (15 Punkte)

Man betrachte ein System aus N unterscheidbaren, quantenmechanischen, harmonischen Oszillatoren. Diese seien ungekoppelt und besitzen alle die gleiche Kreisfrequenz ω . Mikrozustände des Gesamtsystems sind Tensorprodukte der einzelnen Oszillatorzustände und daher durch N quantenzahlen n_i spezifiziert,

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_N\rangle . \quad (5)$$

Absteigeoperatoren a_i wirken definitionsgemäß auf die i -te Komponente, also

$$a_i = \mathbf{1}^{\otimes(i-1)} \otimes a \otimes \mathbf{1}^{\otimes(N-i)} \quad (6)$$

und Sinngemäßes gilt für Aufsteigeoperatoren. Wir schreiben also für den Hamiltonoperator des Gesamtsystems

$$H = \sum_{i=1}^N \hbar\omega \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) . \quad (7)$$

Wir betrachten zunächst den Fall $N = 3$ und ferner das Ensemble aus allen Zuständen der Gesamtenergie $E = \frac{9}{2}\hbar\omega$.

a) Wie viele und welche Mikrozustände führen zu dieser Energie E ? (1 Punkt)

b) Mit welcher Wahrscheinlichkeit $p(\epsilon)$ findet man einen ausgewählten Oszillator mit der Energie ϵ ? (2 Punkte)

Im Folgenden soll die Anzahl an Mikrozuständen fester Gesamtenergie E durch ein Sattelpunktintegral approximiert werden, wobei N sehr groß sei. Diese ist gegeben durch

$$\Omega(E) = \text{Sp} \delta(H - E). \quad (8)$$

c) Zeigen Sie zunächst unter Nutzung der Integraldarstellung der δ -Distribution die Identität

$$\Omega(E) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikE} \left(\frac{e^{-ik\hbar\omega/2}}{1 - e^{-ik\hbar\omega}} \right)^N \frac{dk}{2\pi}. \quad (9)$$

(2 Punkte)

d) Führen Sie die Sattelpunktintegration durch und zeigen Sie somit

$$\Omega(E) \approx \exp(N [x_+ \log(x_+) - x_- \log(x_-)]). \quad (10)$$

Hierbei haben wir die Notation $x_{\pm} = (\hbar\omega)^{-1} \left(\frac{E}{N} \pm \frac{\hbar\omega}{2} \right)$ eingeführt.

Hinweis: Wir erinnern an die Sattelpunktmethode. Schreiben Sie (9) in der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{Nf(k)} \frac{dk}{2\pi} \quad (11)$$

und entwickeln Sie f bis zur quadratischen Ordnung um sein Maximum.

(5 Punkte)

Abschließend wollen wir anhand von (10) die Entropie S und die Temperatur T des Ensembles bestimmen. Diese erfüllen

$$S(E) = k_B \log \Omega(E) \quad \text{und} \quad T(E) = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)^{-1} \quad (12)$$

mit der Boltzmann-Konstanten k_B .

e) Berechnen Sie $S(E)$ und $T(E)$. (2 Punkte)

f) Durch Invertieren bestimmen Sie ferner $E(T)$. (2 Punkte)

g) Diskutieren Sie das Verhalten von T , wenn sich E der quantenmechanischen Nullpunktsenergie des Systems nähert. (1 Punkt)