Theoretische Physik IV (Statistische Physik)

Vorlesung: Prof. Dr. Albrecht Klemm
Übungsleitung: M. Sc. Fabian Fischbach
http://www.th.physik.uni-bonn.de/people/fischbach/ws1920/tp4/index.php

–Hausaufgaben–

Abgabe der Hausaufgaben: Mo.-Mi. 28.-30.10.2019 (in den Übungen)
Besprechung der Hausaufgaben: Mo.-Mi. 04.-06.11.2019 (in den Übungen)

H.3.1 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 von Phasenraumvolumina 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

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

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

H.3.2 Das Mikrokanonische Ensemble (10 Punkte)

Hier möchten wir einige Schritte in der klassischen Berechnung von $\Omega(E)$ wiederholen. Diese Größe gibt die Oberfläche einer Energieschale im Phasenraum an.

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \ \delta(\phi(x)) \ \mathrm{d}x = \sum_n \frac{f(x_n)}{|\phi'(x_n)|} \tag{2}$$

gilt, wobei x_n eine Nullstelle der Funktion[1] $\phi(x)$ ist. Die Summe in (2) erstreckt sich also über alle Nullstellen von $\phi(x)$.

(2 Punkte)

b) Betrachten Sie die Hamiltonfunktion $H(q,p)$, wobei q und p zwei $3N$-dimensionale Koordinaten des $6N$-dimensionalen Phasenraums sind. Eine Äquienergiefläche[2] hierin ist dann gegeben durch $H(q,p) = E$ für eine Konstante E. Entwickeln Sie die Funktion $H(q,p)$

[1] Die Funktion muss hierfür stetig differenzierbar und die Nullstellen einfach sein.
[2] Dies ist eine $6N-1$-dimensionale Hyperfläche und wir nutzen eine sprachliche Analogie zur Äquipotentialfläche der Elektrodynamik.

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

$$\Omega(E) = \int \frac{\mathrm{d}q\ \mathrm{d}p}{h^{3N} N!}\ \delta\left(E - H(q,p)\right)\ . \tag{3}$$

Hinweis: Vergleichen Sie mit den Gleichungen (2.2.4) und (2.2.4′) im Lehrbuch von Schwabl zur statistischen Mechanik.
(*1 Punkt*)

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

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2\ . \tag{4}$$

d) Bestimmen Sie die Geometrie einer Äquienergiefläche sowie die Phasenbahn $(q(t), p(t))$ des harmonischen Oszillators.
(*2 Punkte*)

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

Wir betrachten jetzt den Fall $N \gg 1$ und wollen das Volumen innerhalb der Äquienergiefläche berechnen, welches in drei Raumdimensionen durch[3]

$$\bar{\Omega}(E) = \int \frac{\mathrm{d}q\ \mathrm{d}p}{h^{3N} N!}\ \Theta(E - H(q,p)) \tag{5}$$

gegeben ist. Für N klassische, dreidimensionale harmonische Oszillatoren ohne Wechselwirkung lautet die Hamiltonfunktion

$$H(q,p) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{|p_i|^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} |q_i|^2 \right)\ . \tag{6}$$

f) Berechnen Sie $\bar{\Omega}(E)$ indem Sie das Integral in $6N$-dimensionalen Kugelkoordinaten schreiben (vgl. Vorlesung bzw. Abschnitt 2.2.2 im Lehrbuch von Schwabl). Bestimmen Sie anschließend $\Omega(E) = \partial_E \bar{\Omega}(E)$. (*3 Punkte*)

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

[3] Hierin bezeichnet Θ die Heaviside-Funktion.

des Gesamtsystems sind Tensorprodukte der einzelnen Oszillatorzustände und daher durch N quantenzahlen n_i spezifiziert,

$$|n_1, n_2, ..., n_N\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes ... |n_N\rangle \,. \tag{7}$$

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

$$a_i = \mathbb{1}^{\otimes(i-1)} \otimes a \otimes 1^{\otimes(N-i)} \tag{8}$$

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

$$H = \sum_{i=1}^{N} \hbar\omega \, \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) . \tag{9}$$

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 Warscheinlichkeit $p(\epsilon)$ 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 $N \gg 1$ sehr groß sei. Diese ist gegeben durch

$$\Omega(E) = \mathrm{Sp}\, \delta(H - E). \tag{10}$$

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

$$\Omega(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kE} \left(\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\hbar\omega/2}}{1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\hbar\omega}} \right)^N \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}. \tag{11}$$

(2 Punkte)

d) Führen Sie die Sattelpunktintegration durch und zeigen Sie somit

$$\Omega(E) \approx \exp\left(N \;\left[x_+ \log(x_+) - x_- \log(x_-)\right]\;\right) . \tag{12}$$

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 (11) in der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{Nf(k)} \, \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \tag{13}$$

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

(5 Punkte)

Abschließend wollen wir anhand von (12) die Entropie S und die Temperatur T des Ensembles bestimmen. Diese seien durch

$$S(E) = k_\mathrm{B} \log \Omega(E) \qquad \text{und} \qquad T(E) = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)^{-1} \tag{14}$$

mit der Boltzmann-Konstanten $k_\mathrm{B} > 0$ definiert.

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)