Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. Ch. Jurecka

THERMODYNAMIK UND STATISTISCHE MECHANIK WS 1998/99

12. Übungsblatt Abgabe: Dienstag, 12. 1. 99, bis 11.25 Uhr

30. **Der quantenmechanische Virialsatz**

Beweisen Sie den Virialsatz in einer Dimension

$$\mathrm{Sp}\left[\left(\frac{p^2}{m} - x\frac{\partial W(x)}{\partial x}\right)\rho\right] = 0 \tag{1}$$

für ein Teilchen im Potential $W(x)$. Nehmen Sie hierzu an, daß der Dichteoperator des Systems ρ stationär ist, d.h. $[H, \rho] = 0$. Gehen Sie dann von $\mathrm{Sp}(px[H, \rho]) = 0$ aus.

31. **Virialsatz für klassische Teilchen – Zeitmittelung**

Der Virialsatz läßt sich auch direkt aus der klassischen Mechanik durch eine Zeitmittelung entlang der Bahn im Phasenraum ableiten[1]. Gehen Sie dazu von der Größe $G = \sum_i \vec{p}_i \vec{r}_i$ aus (der Index i numeriert die Teilchen.). Berechnen Sie die totale Zeitableitung von G. Zeigen Sie zunächst, daß für das Zeitmittel dieser Ableitung $< \frac{dG}{dt} >$ gilt:

$$\left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle = \frac{1}{t}\left(G(t) - G(0)\right). \tag{2}$$

Lassen Sie nun den Zeitraum, über den Sie mitteln, gegen unendlich gehen: Sie sollten den Virialsatz entdecken.

32. **Anwendung des Virialsatzes**

Man bestimme das Verhältnis von mittlerer potentieller und mittlerer kinetischer Energie beim harmonischen Oszillator und bei Teilchen mit Coulombwechselwirkung.

33. **Klassisches Gas mit Wechselwirkung**

Man betrachte ein klassisches Gas von N Punktteilchen mit Wechselwirkung

$$\Phi(r_{i,j}) = \frac{A}{r_{i,j}^n} \qquad A > 0; n > 0; \tag{3}$$

zwischen den Teilchen im Volumen V bei Temperatur T, Energie E und Druck P.

(a) Setzen Sie die quasiklassische Zustandssumme $Z(T, V)$ an. Führen sie die (bereits bekannte) Impulsintegration aus.

(b) Zeigen Sie, daß gilt[2]: $Z(\alpha T, V) = f(\alpha) Z(T, g(\alpha) V))$, wobei $f(\alpha) = \alpha^{3N(1/2-1/n)}$ und $g(\alpha) = \alpha^{3/n}$. (Hinweis: $\Phi(\eta r) = \eta^{-n}\Phi(r)$).

[1] Man kann das als ein Beispiel für die Gleichheit von Zeit- und Ensemblemittel auffassen. Hier wird tatsächlich das System während eines langen Zeitraums statt vieler Systeme innerhalb eines kurzen Zeitintervalls betrachtet.

[2] $\alpha > 0$

(c) Zeigen Sie mit (b), daß die freie Energie $F(T,V)$ eine Funktion von α und $F(u(\alpha)T, v(\alpha)V)$ ist. Zeigen Sie dann durch geeignete Differentiation, daß

$$E = aPV + bNkT. \tag{4}$$

Wie lauten die Konstanten a und b?