INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Technische Universität Braunschweig

Prof. Dr. W. Brenig
M.Sc. Boris Celan
Dipl.-Phys. Björn Willenberg

Thermodynamik und Quantenstatistik WiSe 2013/14

3. Übungsblatt Abgabe: Di, 5.11.2013 bis 11.30 Uhr, Kasten neben A316

Übungsblätter gibt es unter `https://www.tu-bs.de/theophys/edu/wise-1314/thermo1314`.

6. **Zustandssumme und Zustandsdichte des idealen Gases**
Wir betrachten die thermodynamischen Eigenschaften des idealen Gases. Dazu werden N wechselwirkungsfreie Teilchen in einen Würfel der Kantenlänge L gesperrt. Zur Beschreibung des Würfels kann man sich ein Potential vorstellen, welches innerhalb des Würfels 0 und ausserhalb unendlich ist. Berechnen Sie die **Zustandssumme** Z, **Zustandsdichte** $\Omega(E)$ und die **Zahl der Zustände** $g(E)$ bis zur Energie E.
Gehen Sie dabei wie folgt vor:

(a) Die N Teilchen und die dazugehörigen $6N$ Phasenraumkoordinaten sind voneinander unabhängig (vgl. Annahmen) – es kann deshalb zunächst der Hamiltonoperator für ein Teilchen in einer Dimension betrachtet werden. Geben Sie die Lösung der Wellenfunktion und der Energie an.

(b) Berechnen Sie nun die Zustandssumme für N Teilchen in drei Dimensionen.
Hinweis: Es treten in der Aufgabe Gauß-Integrale $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$ auf. Um diese zu berechnen bieten sich Polarkoordinaten an.

(c) Um die Anzahl der Zustände bis zur Energie E zu bestimmen, braucht man das Volumen einer $3N$-dimensionalen Kugel (warum?):

i. Schreiben Sie ein Volumenintegral in kartesischen Koordinaten über den Integranden 1 für eine Kugel mit Radius R in N Dimensionen auf.

ii. Versuchen Sie mithilfe einer Substitution daraus ein Volumenintegral über eine Einheitskugel zu machen.

iii. Berechnen Sie anschließend folgenden Ausdruck:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dx_N \, e^{-(x_1^2+x_2^2+\ldots+x_N^2)}$$

Wovon hängt der Integrand ab? Sie können demnach die Integration über Kugelschalen ausführen, d.h.:

$$dV = dx_1 \ldots dx_N \to d(\text{Kugelschale})\, dR$$

Überlegen Sie sich dazu, wie das Volumen der Kugel mit ihrer Oberfläche zusammenhängt. Sie können die Überlegung immer mit dem Ihnen bekannten Fall aus dem $\mathbb{R}^3$ überprüfen.

iv. Eine Vereinfachung der auftretenden Integrale kann mit Hilfe der Γ-Funktion erreicht werden:

$$\Gamma(n) = \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-x}$$

Bitte wenden! →

v. Überprüfen Sie das Ergebnis für das Volumen einer Kugel im $\mathbb{R}^3$ mithilfe der Rekursionsformel für $\Gamma(n)$:

$$\Gamma(n+1) = n\,\Gamma(n); \qquad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$$

(d) Mithilfe des in Aufgabenteil (c) bestimmten Volumens einer N-dimensionalen Kugel können Sie das Phasenraumvolumen von $3N$ Variablen zu einer Energie E bestimmen. Es fehlt nur noch die obere Integrationsgrenze, also der Radius der $3N$-dimensionalen Kugel dem die Energie E entsprechen muss.

(e) Um die Zustandsdichte $\Omega(E)$ zu bestimmen überlegen Sie sich, was die Zustandsdichte ist und wie sie mit $g(E)$ in Beziehung steht.

7. **Dichteoperatoren von Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchen**

Für die Komponenten S^α mit $\alpha \in \{x, y, z\}$ des Spinoperators $\vec{S}$ eines quantenmechanischen Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchens gilt $\left[S^\alpha, S^\beta\right] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S^\gamma$ und $\vec{S}^2 = \sum_\alpha S^\alpha S^\alpha = \frac{3\hbar}{4}$.

(a) Zeigen Sie, dass für die S^α gilt: $\operatorname{Sp} S^\alpha = 0$.
Hinweis: Zeigen Sie zunächst, dass $\operatorname{Sp} AB = \operatorname{Sp} BA$.

(b) i. Welche Bedingung muss ein Dichteoperator für ein Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen erfüllen?

ii. Beweisen Sie, dass
$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{u}\,\vec{\sigma})$$
mit $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ einem Vektor mit den drei Paulimatrizen als Komponenten und $\vec{u}$ einem reellen Parametervektor, die von Ihnen aufgestellten Bedingungen erfüllt. Nehmen Sie an, dass $\rho \geq 0$ für geeignete Werte von $\vec{u}$ erfüllt ist.

(c) Zeigen Sie, dass $\vec{u}$ identisch ist mit dem Mittelwert $\langle\vec{\sigma}\,\rangle = \operatorname{Sp}(\rho\,\vec{\sigma})$.

(d) Der Dichteoperator habe die Eigenwerte ρ_1 und ρ_2. Drücken Sie $\operatorname{Sp}\rho$ und $\operatorname{Sp}\rho^2$ durch ρ_1 und ρ_2 aus.

(e) Begründen Sie, dass $u := |\vec{u}| \leq 1$ sein muss. Welche Eigenschaft von $\vec{u}$ charakterisiert einen reinen Zustand?

(f) Nun betrachte man N Teilchen in einem Neutronenstrahl. Die Hälfte der Teilchen sei in Richtung der positiven x-Achse, die andere Hälfte in Richtung der negativen y-Achse ausgerichtet.

i. Geben Sie den Dichteoperator an.

ii. Wie sieht der Dichteoperator aus, wenn man über die Spins der zweiten Hälfte gar nichts weiß?