Aufgabe 1: (Klassische Zustandssumme) (5 Punkte)

N nicht miteinander wechselwirkende klassische Teilchen befinden sich im Inneren einer Kugel (um den Ursprung) mit dem Radius R in einem Potential $U(\vec{r}) = \alpha\,|\vec{r}|^3$.

(a) Berechnen Sie die klassische kanonische Zustandssumme Z.

(b) Berechnen Sie die innere Energie U.
Wie lautet diese für die Grenzfälle **(i)** $R \to \infty$ und **(ii)** $\alpha \to 0$?
Wie verhält sich die innere Energie U für hohe Temperaturen T?

(c) Berechnen Sie die spezifische Wärme C_v. Wie verhält sich diese für hohe bzw. tiefe Temperaturen T?

$\frac{1}{\beta}\int e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}$

a) $$Z_{kl.kan.} = \frac{1}{N!}\left(\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{R} e^{-\beta\alpha|\vec{r}|^3}|\vec{r}|^2 \sin\vartheta\, d|\vec{r}|\, d\vartheta\, d\varphi\right)^N \cdot \frac{1}{\lambda_T^{3N}} =$$

$$= \frac{1}{N!\,\lambda^{3N}}\left(\frac{4\pi}{3}\int_0^{R^3} e^{-\beta\alpha|\vec{r}|^3}\, d(|\vec{r}|^3)\right)^N = \ldots$$

$$= \frac{1}{N!\,(\lambda)^{3N}}\left(\frac{4\pi}{3\beta\alpha}\left(1-e^{-\beta\alpha R^3}\right)\right)^N = \ldots$$

$$= \frac{1}{N!}\left(\frac{4\pi k_B T}{3\alpha}\cdot\left(\frac{m k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot\left(1-e^{-\beta\alpha R^3}\right)\right)^N \quad \text{mit } \beta = \frac{1}{k_B T}$$ ✓

b) $$U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_{kl.kan.} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\ln N! + N\ln\left(\frac{4\pi}{3\alpha}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\left(\frac{1}{\beta}\right)^{5/2}\left(1-e^{-\beta\alpha R^3}\right)\right)\right)$$

$$= -N\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\frac{5}{2}\ln\beta + \ln\left(1-e^{-\beta\alpha R^3}\right)\right) = \frac{5}{2}N\frac{1}{\beta} - \alpha R^3 N\frac{e^{-\beta\alpha R^3}}{1-e^{-\beta\alpha R^3}}$$

$$= \frac{5}{2}Nk_BT - N\alpha R^3\frac{1}{e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}-1} = U$$ ✓

i) $\lim\limits_{R\to\infty} U = \lim\limits_{R\to\infty}\left(\frac{5}{2}Nk_BT - N\alpha R^3 \frac{1}{e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}-1}\right) \longrightarrow \frac{5}{2}Nk_BT_c$

ii) für $\alpha \to 0$ folgt:

$$\lim_{\alpha\to 0} U = \lim_{\alpha\to 0}\left(\frac{5}{2}Nk_BT - NR^3\frac{\alpha}{e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}-1}\right) \overset{\text{l'Hospital}}{=} \dots$$

$$\dots = \frac{5}{2}Nk_BT - NR^3 \lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\frac{R^3}{k_BT}e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}} = \frac{5}{2}Nk_BT - Nk_BT = \frac{3}{2}Nk_BT$$

Also: $\lim\limits_{\alpha\to 0} U = \frac{3}{2}Nk_BT$ (ideales Gas bei $\alpha\to 0$)

Für hohe Temperaturen $T\to\infty$ folgt:

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}-1} = \lim_{\frac{\alpha R^3}{k_BT}\to 0}\frac{1}{e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}-1} \approx \lim_{T\to\infty}\frac{1}{\frac{\alpha R^3}{k_BT}} = \lim_{T\to\infty}\frac{k_BT}{\alpha R^3}$$

Damit folgt für $T\to\infty$:

$$\lim_{T\to\infty} U \approx \lim_{T\to\infty}\left(\frac{5}{2}Nk_BT - Nk_BT\right) = \lim_{T\to\infty}\frac{3}{2}Nk_BT$$

c) $C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = -k_B\beta^2\frac{\partial}{\partial\beta}U = \frac{5}{2}Nk_B + Nk_B\alpha R^3\beta^2\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{e^{\alpha R^3\beta}-1} = \dots$

$$\dots = \frac{5}{2}Nk_B + \frac{N\alpha R^3}{k_BT^2}\left(-\frac{\alpha R^3 e^{\alpha R^3\beta}}{(e^{\alpha R^3\beta}-1)^2}\right)$$

Also: $C_V = \frac{5}{2}Nk_B - \frac{N\alpha^2R^6}{k_B}\frac{e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}}{T^2\left(e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}-1\right)^2}$

$$\lim_{T\to\infty} C_V = \frac{5}{2}Nk_B - \frac{N\alpha^2R^6}{k_B}\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T^2\left(e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}-2+e^{-\frac{\alpha R^3}{k_BT}}\right)} \approx \dots$$

$$\dots \approx \frac{5}{2}Nk_B - \frac{N\alpha^2R^6}{k_B}\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T^2\left(\cancel{1}+\cancel{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}-\cancel{2}+\cancel{1}-\cancel{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}+\frac{2}{2!}\left(\frac{\alpha R^3}{k_BT}\right)^2\right)}$$

Rest von 1 c)

$$\Rightarrow \lim_{T\to\infty} C_V \approx \lim_{T\to\infty}\left(\frac{5}{2}Nk_B - \frac{N\alpha^2R^6}{\cancel{k_B}}\frac{k_B^{\cancel{2}}\cancel{T^2}}{\cancel{T^2\alpha^2R^6}}\right) \approx \frac{3}{2}Nk_B$$

Also: $\lim\limits_{T\to\infty} C_V \approx \frac{3}{2}Nk_B$ ✓

$$\lim_{T\to 0} C_V = \frac{5}{2}Nk_B - \frac{N\alpha^2R^6}{k_B}\lim_{T\to 0}\frac{1}{T^2\left(e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}} - 2 + e^{-\frac{\alpha R^3}{k_BT}}\right)} = \ldots$$

$$\ldots = \frac{5}{2}Nk_B - \frac{N\alpha^2R^6}{k_B}\lim_{T\to 0}\frac{e^{-\frac{\alpha R^3}{k_BT}}}{T^2} = \cancel{2\times\text{l'Hospital}} \ldots$$

$$\ldots = \frac{5}{2}Nk_B - \frac{N\alpha^2R^6}{k_B}\lim_{T\to 0}\frac{1}{T^2 e^{\frac{\alpha R^3}{k_BT}}} \to \frac{5}{2}Nk_B$$

Also: $\lim\limits_{T\to 0} C_V \to \frac{5}{2}Nk_B$ ✓ Oder?

5/5

Aufgabe 2: (Dreiniveausystem) (5 Punkte)

Ein quantenmechanisches System besitze drei Energieniveaus, $E = 0$ und $E = \pm\varepsilon$ und befinde sich im Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T. Das Energieniveau $E = 0$ sei zweifach entartet. Berechnen Sie in Abhängigkeit von T den Mittelwert der Energie und die Entropie. Berechnen Sie für beide Größen den Grenzwert für $T \to \infty$, für die mittlere Energie auch den Grenzwert für $T \to 0$.

$$Z^{QM} = 2e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2} = \ldots$$

$$\ldots = 2 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{\beta\varepsilon} = Z^{QM}$$ ✓

$$\langle U \rangle = \frac{0 \cdot 2 + \varepsilon e^{-\beta\varepsilon} - \varepsilon e^{\beta\varepsilon}}{Z^{QM}} = \varepsilon \frac{e^{-\beta\varepsilon} - e^{\beta\varepsilon}}{2 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{\beta\varepsilon}}$$ ✓

Also: $\langle E \rangle(t) = \varepsilon \dfrac{e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} - e^{+\frac{\varepsilon}{k_B T}}}{2 + e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} + e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}}$

Für $T \to \infty$ folgt:

$$\lim_{T\to\infty} \langle E \rangle = \varepsilon \lim_{T\to\infty} \frac{e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} - e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}}{2 + e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} + e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}} = 0$$ ✓

$$\lim_{T\to 0} \langle E \rangle = \lim_{\beta\to\infty} \varepsilon \frac{e^{-\beta\varepsilon} - e^{\beta\varepsilon}}{2 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{\beta\varepsilon}} = \lim_{\beta\to\infty} \frac{-\varepsilon e^{\beta\varepsilon}}{2 + e^{\beta\varepsilon}} = -\varepsilon$$ ✓

Zur Entropie:

$$S = \cancel{(\ldots)} - \frac{\partial \Phi}{\partial T} = -\frac{\partial}{\partial T}\left(-k_B T \ln Z\right) =$$

$$\ldots = k_B \ln Z + k_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln Z = k_B \ln\left(2 + e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} + e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}\right) + k_B T \, \frac{\frac{\varepsilon}{k_B T^2}\left(e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} - e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}\right)}{2 + e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} + e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}}$$

$$S = -k_B \, \mathrm{Sp}\left(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\right), \quad \hat{\rho} = \frac{1}{Z}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} \end{pmatrix}, \quad \ln \hat{\rho} = -\ln Z + \ln\begin{pmatrix} 2 & & \\ & e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} & \\ & & e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} \end{pmatrix}$$

$$\cancel{S = -k_B \, \mathrm{Sp}\left(\frac{1}{Z}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} & 0 \\ 0 & 0 & e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} \end{pmatrix}\right)}$$

$$S = -\frac{\partial}{\partial T}\left(-k_B T \ln Z\right) = -\frac{\partial \Phi}{\partial T} = k_B \ln Z + k_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln Z = \ldots$$

$$\ldots = k_B \ln\left(2 + e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} + e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}\right) + \frac{\varepsilon}{T} \, \frac{e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} - e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}}{2 + e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} + e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}} = S \quad \checkmark$$

$$\lim_{T \to \infty} S = \cancel{k_B \lim_{T\to\infty} \ln(2+} = k_B \ln(4) + \varepsilon \lim_{T \to \infty} \frac{e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} - e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}}{T\left(2 + e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} + e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}}\right)} = \ldots$$

$$\ldots = k_B \ln 4 + \varepsilon \lim_{T \to \infty} \frac{e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T}} - e^{+\frac{\varepsilon}{k_B T}}}{4T} \cancel{= \ldots = k_B \ln 4}$$

$$\cancel{\ldots = (\ln 4) k_B + \frac{\varepsilon^2}{k_B 4}} \quad \ldots \approx k_B \ln 4 + \varepsilon \lim_{T \to \infty} \frac{\cancel{1} - \frac{\varepsilon}{k_B T} - \cancel{1} - \frac{\varepsilon}{k_B T}}{4T}$$

$$\cancel{\ldots} \left[\lim_{T \to \infty} S \cong k_B \ln(4) - \frac{2\varepsilon^2}{4 k_B T^2} \text{ für } T \to \infty\right]$$

$$\Rightarrow \lim_{T \to \infty} S \cong k_B \lim_{T \to \infty}\left(\ln(4) - \frac{\varepsilon^2}{2 k_B T^2}\right) = k_B \ln(4) \quad ? \quad \checkmark$$

5

Aufgabe 3: (Dichteoperator) (5 Punkte)

Ein quantenmechanisches System besitze drei normierte Energieeigenzustände $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle$, $|\Psi_3\rangle$ mit den Energien E_1, E_2, E_3. Es befinde sich zur Zeit $t = 0$ mit den Wahrscheinlichkeiten p_i in den Zuständen $|\Psi_i\rangle$, mit $p_1 = p < 1$ und $p_3 = 0$.

(a) Geben Sie den Hamiltonoperator und den Dichteoperator zur Zeit $t = 0$ explizit (als Matrix) an.
Was muß für p_2 gelten ?

(b) Ist der Dichteoperator stationär ?

(c) Berechnen Sie $\langle \hat{H} \rangle$ und $\langle \hat{H}^2 \rangle$.

(d) Handelt es sich um einen reinen Zustand ?

a) $\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij}$

$$\underset{\sim}{\hat{\mathcal{H}}} = \begin{pmatrix} E_1 & & 0 \\ & E_2 & \\ 0 & & E_3 \end{pmatrix} \checkmark \quad \underset{\sim}{\hat{\rho}} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \checkmark$$

Normierung: $Sp(\underset{\sim}{\hat{\rho}}) \overset{!}{=} 1 = p + p_2 + 0 \Rightarrow \underline{\underline{p_2 = 1 - p}} \checkmark$

Also $$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 1-p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \checkmark$$

b) Liouville: $i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \{\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}\}$

$$\Rightarrow \{\underset{\sim}{\hat{\mathcal{H}}}, \underset{\sim}{\hat{\rho}}\} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 1-p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 1-p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} E_1 p & & 0 \\ & E_2(1-p) & \\ 0 & & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} pE_1 & & 0 \\ & (1-p)E_2 & \\ 0 & & 0 \end{pmatrix} = 0 = i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t}$$

$\Rightarrow$ Der Dichteoperator ist stationär! $\checkmark$

$\longrightarrow$

c) $\langle \hat{H} \rangle = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{H}) =$ schon berechnet $= \ldots$

$$\ldots = \mathrm{Sp}\begin{pmatrix} pE_1 & 0 & 0 \\ 0 & (1-p)E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \underline{\underline{pE_1 + (1-p)E_2 = \langle \hat{H} \rangle}} \checkmark$$

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \mathrm{Sp}\left(\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 1-p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix} \right) = \ldots$$

$$\ldots = \mathrm{Sp}\left(\begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & 1-p & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^2 \end{pmatrix} \right) = \mathrm{Sp}\begin{pmatrix} pE_1^2 & & \\ & -E_2^2(p-1) & \\ & & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\langle \hat{H}^2 \rangle = pE_1^2 + (1-p)E_2^2}} \checkmark$$

d) Reiner Zustand?

$\hat{\rho}^2 \overset{!}{=} \hat{\rho}$ für reinen Zustand $\Rightarrow \hat{\rho}^2 = \begin{pmatrix} p^2 & 0 & 0 \\ 0 & (1-p)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Reiner Zustand für $p^2 = p$ und $(1-p)^2 = 1-p$!

Also Reiner Zustand bei $p = 0$ oder $p = 1$! $\checkmark$

Klar!

Aufgabe 4: (Freie Fermionen) (5 Punkte)

Berechnen Sie für ein dreidimensionales Gas von freien Fermionen mit Spin s die Kompressibilität bei $T = 0$, ausgedrückt durch die Teilchendichte $\varrho = N/V$ ...

(a) ...für nicht relativistische Teilchen.

(b) ...für extrem relativistische Teilchen.

Hinweis: Berechnen Sie zunächst den Druck.

$$\frac{1}{V}\frac{\partial V}{\partial p}\Big|$$

Kompressibilität?

?

Freie Fermionen:

$$a)\ \boxed{Z_\lambda^F = \prod_{\vec{p},s}\left(1+e^{-\beta\frac{\vec{p}^2}{2m}}\right)}$$

falsch abgeschrieben!

$$\Rightarrow \ln Z_\lambda^F = \sum_{\vec{p},s}\ln\left(1+e^{-\frac{\beta\vec{p}^2}{2m}}\right) = \ldots$$

$$\ldots \Rightarrow \frac{(2s+1)V}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{|\vec{p}|\to\infty}\ln\left(1+e^{-\frac{\beta\vec{p}^2}{2m}}\right)p^2\,dp\,\sin\vartheta\,d\vartheta\,d\varphi =$$

$$\ldots = \frac{4\pi V(2s+1)}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty \ln\left(1+e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\right)p^2\,dp$$

$$p = -\frac{\partial\left(-\frac{1}{\beta}\ln Z_\lambda\right)}{\partial V} = k_B T\,\frac{4\pi(2s+1)}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^\infty \ln\left(1+e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}\right)p^2\,dp$$

partielle Integration:

$$\ldots = \frac{4\pi}{3}\frac{(2s+1)}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{k_B T m}\int_0^\infty\frac{p^4\,dp}{1+e^{\frac{\beta p^2}{2m}}}$$

Subst.: $1+e^{\frac{\beta p^2}{2m}} = X$