Aufgabe 1 *(Ultra-)relativistisches ideales Gas* **4 P.**

Betrachten Sie ein klassisches relativistisches ideales Gas mit einer kinetischen Energie

$$T(\vec{p_1}, ..., \vec{p_N}) = \sum_{i=1}^{N} \sqrt{m^2c^4 + (c\vec{p_i})^2}\,, \qquad (1)$$

wobei c die Lichtgeschwindigkeit bezeichnet. Jedes der N Teilchen habe die Masse m und die Teilchen befinden sich in einem Volumen V. Betrachten Sie der Einfachheit halber den ultrarelativistischen Grenzfall $m = 0$.

a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme $Z(T, V, N)$ in drei Dimensionen. *2 P.*

b) Berechnen Sie aus der kanonischen Zustandssumme die innere Energie $E = \langle \mathcal{H} \rangle$ und vergleichen Sie ihr Ergebnis mit der inneren Energie des nicht-relativischem idealen Gases. *1 P.*

c) Berechnen Sie mit Hilfe der kanonischen Zustandssumme den Druck p und leiten Sie daraus die Zustandsgleichung her. *1 P.*

$T = c\sum_{i=1}^{N} |\vec{p}_i|$ im Grenzfall

Die Zustandssumme eines Teilchens in der kanonischen Ensemble ist (in 3-dim)

$$Z_1 = \frac{V}{h^3}\int e^{-\beta c|\vec{p}|}\, d\vec{p}$$

$$Z_1 = \frac{V}{h^3}\int e^{-\beta c r}\, r^2 \sin\theta\, dr\, d\phi\, d\theta$$

$$= \frac{4\pi V}{h^3}\int_0^\infty e^{-\beta c r}\, r^2\, dr$$

$$= \frac{4\pi V}{h^3}\frac{2}{c^3\beta^3} = \frac{V}{\pi^2 c^3 \beta^3 \hbar^3} = \frac{V k_B^3 T^3}{\pi^2 c^3 \hbar^3}$$

Und damit die Zustandssumme von N Teilchen

$$Z = \frac{1}{N!} Z_1^N = \frac{V^N}{N!\,\pi^2}\frac{1}{(c\beta\hbar)^{3N}} \qquad \frac{1}{N!}\frac{V^N}{\pi^{2N}}\left(\frac{k_B T}{c\hbar}\right)^{3N}$$

In der kanonischen Ensemble

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z$$

$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-3N\ln\beta\right) = 3Nk_B T$$

$$p = k_B T\frac{\partial}{\partial V}\ln Z$$

$$= \frac{Nk_B T}{V}$$

$$PV = Nk_B T$$

Aufgabe 2 *Energieschwankung im kanonischen Ensemble* **3 P.**

a) Zeigen Sie, dass im kanonischen Ensemble die Schwankung ΔE der Energie durch *2 P.*

$$(\Delta E)^2 = k_B T^2 \frac{\partial E(T,\alpha)}{\partial T} \tag{2}$$

gegeben ist. Hierbei gilt $E(T,\alpha) = \langle \mathcal{H} \rangle$ und α seien zwei äußere Parameter (zum Beispiel V und N). Die Varianz hat die folgende Form:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \tag{3}$$

b) Zeigen Sie mit Gleichung (2), dass die Wärmekapazität $C_V = \frac{\partial E(T,V,N)}{\partial T}$ positiv ist. *1 P.*

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z}\int H(\vec{p},\vec{q})^2 \rho(\vec{p},\vec{q})\, d\Gamma(\vec{p},\vec{q})$$

$$= \frac{1}{Z}\int H^2 e^{-\beta H}\, d\Gamma$$

$$= \frac{1}{Z}\int \left(\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} e^{-\beta H}\right) d\Gamma$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{\partial^2}{\partial \beta^2}\int e^{-\beta H}\, d\Gamma$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} Z$$

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} Z - E^2$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial \beta}\left(Z \frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial \beta} Z\right) - E^2$$

$$= \frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial \beta}(-ZE) - E^2$$

$$= -\frac{\partial E}{\partial \beta} - \frac{E}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} - E^2$$

$$= -\frac{\partial E}{\partial \beta} + E^2 - E^2 = -\frac{\partial E}{\partial \beta}$$

$$\frac{d}{d\beta} = \frac{d}{dT}\frac{dT}{d\beta}$$

$$T = \frac{1}{k_B \beta}, \quad \frac{dT}{d\beta} = -\frac{1}{k_B \beta^2}$$

$$\frac{d}{d\beta} = -\frac{1}{k_B \beta^2}\frac{d}{dT}$$

$$(\Delta E)^2 = k_B T^2 \frac{\partial E}{\partial T}$$

b) $0 \leq (\Delta E)^2 = k_B T^2 \frac{\partial E}{\partial T}$

Daher $\frac{\partial E}{\partial T} \geq 0$

Aufgabe 3 *Das Tonks Gas: harte Kugeln in 1D* **8 P.**

Betrachten Sie ein Gas mit N harten Kugeln (Tonks Gas) in einer Dimension. Die harten Kugeln haben einen Durchmesser von l und wechselwirken ansonsten nicht miteinander. Die entsprechende Hamiltonfunktion lautet:

$$\mathcal{H}(x,\, p) \;=\; \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2\,m} + \sum_{i=2}^{N} \mathcal{V}_{\text{hart}}(|x_i \,-\, x_{i-1}|)\,, \tag{4}$$

wobei $\mathcal{V}_{\text{hart}}(|x|) \;=\; \infty$ für $|x| \leq l$ und $\mathcal{V}_{\text{hart}}(|x|) \;=\; 0$ für $|x| > l$ das Potential der harten Kugeln beschreibt.

a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme $Z(T,\, V,\, N)$ des Tonks Gases in einer Dimension (mit $V \,\equiv\, L$). *4 P.*
Hinweis: Machen Sie sich zur Berechnung des Volumenintegrals eine Skizze einer konkreten Anordnung von Kugeln mit $x_{i+1} > x_i$. Welches Volumen steht für die erste Kugel für gegebene Positionen $x_2, \ldots, x_N$ der restlichen Kugeln zur Verfügung? Welche Integrationsgrenzen ergeben sich für x_2, usw.?
Das Endergebnis für die Zustandssumme lautet:

$$Z(T,\, V,\, N) \;=\; \frac{[V \,-\, (N \,-\, 1)\; l]^N}{N!\, \lambda_T^N}\,, \tag{5}$$

mit $\lambda_T \;=\; \sqrt{\frac{h^2}{2\,\pi\; m\, k_{\text{B}}\, T}}$.

b) Berechnen Sie die Helmholtz'sche freie Energie $F(T,\, V,\, N)$ und die Entropie $S(T,\, V,\, N)$ des Systems. Leiten Sie auch die innere Energie E und aus dem Druck p die Zustandsgleichung her. *4 P.*

$$Z(T,V,N) = \frac{1}{N!\,h^N} \int e^{-\frac{\beta p_1^2}{2m}} e^{-\frac{\beta p_2^2}{2m}} \cdots e^{-\frac{\beta p_N^2}{2m}} \, dp_1\, dp_2 \ldots dp_N\, dV_1\, dV_2 \ldots dV_N$$

p integral von $-\infty$ bis ∞

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta x^2}{2m}} \, dx = \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}$$

$$Z(T,V,N) = \frac{1}{N!\,h^N} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{N/2} \int dV_1 \ldots dV_N$$

$$= \frac{1}{N!} \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{N/2} \int dV_1 \ldots dV_N$$

$$= \frac{1}{N!\,\lambda_T^N} \int dV_1 \ldots dV_N$$

$$= \frac{1}{N!\,\lambda_T^N}\, V(V-2l) \ldots (V-2(N-1)l)$$

Näherung: $V(V-2(N-1)l) \approx (V-(N-1)l)^2$

Gilt für $l \ll V$, da

$$V(V-2(N-1)l) = [(V-(N-1)l) + (N-1)l][(V-(N-1)l) - (N-1)l]$$

$$= (V-(N-1)l)^2 - (N-1)^2 l^2$$

$$\approx (V-(N-1)l)^2$$

$$Z(T,V,N) = \frac{1}{N!\,\lambda_T^N} (V-(N-1)l)^N$$

$$F = -k_B T \ln Z$$
$$= -k_B T \left[N\ln\left(V-(N-1)\ell\right) - \ln N! - N\ln\lambda_T \right]$$
$$\approx -k_B T \left[N\ln\left(V-(N-1)\ell\right) - N\ln N + N - N\ln\lambda_T \right]$$
$$\approx -k_B T N \left[\ln \frac{V-(N-1)\ell}{N\lambda_T} + 1 \right]$$

$$-S = \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V} = -k_B N \left[\ln \frac{V-(N-1)\ell}{N\lambda_T} + 1 \right]$$
$$- k_B N T \frac{\partial}{\partial T}\left(-\ln\lambda_T\right)$$
$$\frac{\partial}{\partial T} \ln \lambda_T = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial T}\ln T = -\frac{1}{2T}$$

$$S \simeq k_B N \left[\ln \frac{V-(N-1)\ell}{N\lambda_T} + 1 \right] + \frac{k_B N}{2}$$
$$= k_B N \left[\ln \frac{V-(N-1)\ell}{N\lambda_T} + \frac{3}{2} \right]$$

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial\beta} \ln \lambda_T^N$$
$$= \frac{N}{2} \frac{\partial}{\partial\beta} \ln\beta$$
$$= \frac{N}{2} k_B T$$
$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = \frac{\partial}{\partial V}\left[k_B N T \ln\left(V-(N-1)\ell\right) \right]$$
$$= \frac{k_B N T}{V-(N-1)\ell}$$