

Klausur: Moderne Theoretische Physik IIIa WS 18/19Prof. Dr. Alexander Mirlin
Dr. Stefan Rex**Lösungen / Bewertungsgrundlage**
12.02.2019**1. Maxwell-Boltzmann-Gas im Gravitationsfeld** (Summe: 24 Punkte)

Wir betrachten ein Maxwell-Boltzmann-Gas aus N ununterscheidbaren Teilchen der Masse m (nicht-wechselwirkend, ohne innere Freiheitsgrade wie Rotations- oder Schwingungsmoden) im kanonischen Ensemble. Das Gas soll sich in einem homogenen Gravitationsfeld (parallel zur z -Achse) befinden. Die Energie ist dann gegeben durch

$$H(\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{p}_i\}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + mgz_i \right],$$

wobei $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)^T$ die Orte und \mathbf{p}_i die Impulse der Teilchen sind sowie g die Fallbeschleunigung. Das Volumen soll auf den Halbraum $z > 0$ über einer (großen) Grundfläche A beschränkt sein. Der Einfachheit halber nehmen wir an, dass die Temperatur konstant ist, also insbesondere unabhängig von der Höhe z .

- (a) Wir beginnen mit allgemeinen Betrachtungen zum kanonischen Ensemble. Notieren Sie **(4 Punkte)**
- (i) den Zusammenhang zwischen der kanonischen N -Teilchen-Zustandssumme $Z_N(\beta)$ und der Ein-Teilchen-Zustandssumme $Z_1(\beta)$ für nicht-wechselwirkende ununterscheidbare Teilchen,
 - (ii) wie sich die mittlere Energie $\langle E \rangle$ aus der kanonischen Zustandssumme $Z(\beta)$ berechnen lässt,
 - (iii) wie sich die Varianz der Energie, $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$, aus $Z(\beta)$ berechnen lässt,
 - (iv) den Zusammenhang zwischen freier Energie $F(T, V, N)$ und $Z(\beta)$.
- (b) Berechnen Sie nun für das oben beschriebene Gas die Ein-Teilchen-Zustandssumme $Z_1(\beta)$! **(5 Punkte)**
- (c) Berechnen Sie, ausgehend von (b), $Z_N(\beta)$, die innere Energie $U = \langle E_N \rangle$, und die relative Schwankung der Energie $(\Delta E_N)/U$. Geben Sie die freie Energie und die Entropie des Gases an! **(10 Punkte)**
- (d) Berechnen Sie mithilfe von $Z_1(\beta)$ für *ein* Teilchen die Verteilungsfunktion $W(z)$ für die Wahrscheinlichkeit, sich in der Höhe z aufzuhalten! **(5 Punkte)**
Bemerkung: $W(z)$ ist proportional zur Dichte des Gases in der Höhe z . Sie haben somit die barometrische Höhenformel hergeleitet.

Lösung:

- (a) (i) $Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} (Z_1(\beta))^N$ **(1 P)**
- (ii) $\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta)$ **(1 P)**

$$(iii) \quad (\Delta E)^2 = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \log Z(\beta) \quad (1 \text{ P})$$

$$(iv) \quad F = -\frac{1}{\beta} \log Z \quad (1 \text{ P})$$

(b)

$$\begin{aligned} Z_1(\beta) &= \underbrace{\int dx dy}_{=:A} \int_0^\infty dz \int_{\mathbb{R}^3} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta H_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})} \quad (1 \text{ P}) \\ &= A \left(\int_0^\infty dz e^{-\beta mgz} \right) \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} \frac{dp_y}{2\pi\hbar} \frac{dp_z}{2\pi\hbar} e^{-\beta(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m} \right) \end{aligned}$$

Gauß'sches Impulsintegral (für y, z -Komponenten analog):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi\hbar} e^{-\beta p_x^2/2m} = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} = \frac{1}{\lambda_T} \quad (2 \text{ P})$$

($\lambda_T \dots$ therm. de-Broglie-Wellenlänge)

Höhenintegral:

$$\int_0^\infty dz e^{-\beta mgz} = \frac{1}{\beta mg} \quad (1 \text{ P})$$

Also:

$$Z_1(\beta) = \frac{A}{\lambda_T^3} \frac{1}{\beta mg} \quad (1 \text{ P})$$

(c)

$$Z_N(\beta) = \frac{1}{N!} \left[\frac{A}{\lambda_T^3} \frac{1}{\beta mg} \right]^N \quad (1 \text{ P})$$

$$\log Z_N(\beta) = N \log \left[\frac{A}{\lambda_T^3} \frac{1}{\beta mg} \right] - \underbrace{N(\log N - 1)}_{\text{Stirling}} = N \log \left[\frac{e}{\lambda_T^3} \frac{A}{N\beta mg} \right] \quad (2 \text{ P})$$

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_N(\beta) = \frac{5}{2} N k_B T \quad (2 \text{ P})$$

$$(\Delta E)^2 = -\frac{\partial U}{\partial \beta} = \frac{5}{2} N (k_B T)^2 \quad (1 \text{ P})$$

$$\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} = \sqrt{\frac{2}{5N}} \propto N^{-1/2} \quad \text{wie erwartet} \quad (1 \text{ P})$$

$$F = -k_B T \log Z_N(\beta) = -N k_B T \log \left[\frac{e}{\lambda_T^3} \frac{A}{N\beta mg} \right] \quad (1 \text{ P})$$

$$S = -\frac{F}{T} + \frac{U}{T} = N k_B \log \left[\frac{e}{\lambda_T^3} \frac{A}{N\beta mg} \right] + \frac{5}{2} N k_B \quad (2 \text{ P})$$

Alternativ: $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}$

- (d) Die Wahrscheinlichkeitsverteilung in z erhält man durch ausintegrieren aller anderen Freiheitsgrade: (1 P)

$$W(z) = \frac{1}{Z_1(\beta)} \int dx dy \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta H_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})} \quad (2 \text{ P})$$

Die Integrale über x, y, \mathbf{p} werden völlig analog zu (b) berechnet und kürzen sich daher mit den entsprechenden Termen in der Zustandssumme. Es bleibt

$$W(z) = \beta mg e^{-\beta mgz}, \quad (2 \text{ P})$$

was erwartungsgemäß (siehe barometrische Höhenformel) exponentiell mit z abfällt.

2. Bose-Einstein-Kondensation in zwei Dimensionen (Summe: 11 Punkte)

Wir betrachten nicht-wechselwirkende Bosonen mit der Dispersionsrelation $\varepsilon_{\mathbf{p}} = \kappa |\mathbf{p}|^\alpha$ in zwei Raumdimensionen. Dabei sind $\kappa > 0$ und $\alpha > 0$ konstant.

- (a) Berechnen Sie die Zustandsdichte $\nu(\varepsilon)$. (4 Punkte)
- (b) Notieren Sie mithilfe der Zustandsdichte einen Integralausdruck für die Teilchendichte $\langle N \rangle / V$ (ohne Kondensat). Entscheiden Sie anhand des Verhaltens dieser Teilchendichte für $\mu \rightarrow 0$ (μ ist das chemische Potential), für welche Exponenten α Bose-Einstein-Kondensation möglich ist. Das Integral muss dafür nicht gelöst werden. (7 Punkte)

Lösung:

- (a) Zustandsdichte:

$$\nu(\varepsilon) = \int \frac{d^2 p}{(2\pi\hbar)^2} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{p}}) \quad (1 \text{ P})$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty dp p \delta(\varepsilon - \kappa |\mathbf{p}|^\alpha) = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dp p \frac{\delta(p - p_0)}{\kappa \alpha p_0^{\alpha-1}} \quad (1 \text{ P})$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar^2 \kappa \alpha} \left(\frac{\varepsilon}{\kappa}\right)^{(2-\alpha)/\alpha} = \frac{\kappa^{-2/\alpha}}{2\pi\hbar^2 \alpha} \varepsilon^{(2-\alpha)/\alpha} \quad (2 \text{ P})$$

- (b) Teilchendichte:

$$\frac{\langle N \rangle}{V} = \int_0^\infty d\varepsilon \nu(\varepsilon) n_B(\varepsilon, \beta, \mu) \quad (1 \text{ P})$$

$$= \frac{\kappa^{-2/\alpha}}{2\pi\hbar^2 \alpha} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{(2-\alpha)/\alpha}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (1 \text{ P})$$

Damit Bose-Einstein-Kondensation möglich ist, darf die Teilchendichte ohne Kondensat für $\mu \rightarrow 0$ nicht divergieren. (1 P)

Das Integral für $\mu \rightarrow 0$ ist konvergent, wenn $\alpha < 2$ und divergent wenn $\alpha \geq 2$. (3 P)
Das sieht man z.B. so: Entscheidend für die Konvergenz ist stets das Verhalten bei

kleiner Energie,

$$\int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{(2-\alpha)/\alpha}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \stackrel{\varepsilon_0 \ll k_B T}{=} \int_0^{\varepsilon_0} d\varepsilon \frac{\varepsilon^{(2-\alpha)/\alpha}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} + \underbrace{\int_{\varepsilon_0}^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{(2-\alpha)/\alpha}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}}_{=: I_1, \text{ stets konvergent}}$$

$$\stackrel{\text{Taylor}}{=} \int_0^{\varepsilon_0} d\varepsilon \frac{\varepsilon^{(2-\alpha)/\alpha}}{e^{-\beta\mu}(1 + \beta\varepsilon + \dots) - 1} + I_1$$

$$\stackrel{\mu \rightarrow 0}{=} \frac{1}{\beta} \int_0^{\varepsilon_0} d\varepsilon \varepsilon^{\frac{2}{\alpha}-2} + I_1$$

Das letzte Integral ist bekanntlich divergent, wenn im Exponenten $2/\alpha - 2 \leq -1$.

Für $\alpha \geq 2$ tritt also keine Bose-Einstein-Kondensation auf (wie für $\alpha = 2$ in der Vorlesung besprochen wurde). (1 P)

3. Eigenschaften von Gummi

(Summe: 23 Punkte)

Gummi besteht aus langkettigen Polymermolekülen. Wir verwenden hier das folgende eindimensionale Polymer-Modell, um thermodynamische Eigenschaften eines Gummibandes herzuleiten: Das Polymer ist eine Kette aus N gleichartigen Segmenten s_i der Länge d , die in positive oder negative Richtung orientiert sein können: $s_i = \pm d$ (mit anderen Worten kann der Bindungswinkel zwischen benachbarten Segmenten 0° oder 180° betragen). Die Energie ist dabei in beiden Fällen gleich. Wir bezeichnen die Strecke vom Anfangspunkt zum Endpunkt des Polymers als dessen (vorzeichenbehaftete) Länge $L = \sum_i s_i$. Weiterhin soll die Anzahl aller in positiver Richtung orientierter Segmente mit n_+ bezeichnet werden und entsprechend die Anzahl der negativ orientierten Segmente als n_- .

- Notieren Sie für festes N und n_+ die Anzahl Ω der Konfigurationen (Mikrozustände) des Polymers und eine Näherung für $\ln \Omega$ im Fall $N \gg 1, n_\pm \gg 1$. Notieren Sie $\ln \Omega$ so, dass es nur von N und vom Verhältnis n_+/N abhängt. (6 Punkte)
- Bestimmen Sie für festes L und N die Anzahl n_+ und das Verhältnis n_+/N . Verwenden Sie das Ergebnis aus (a), um die Entropie S für ein langes Polymer in Abhängigkeit von L und N anzugeben. (3 Punkte)
- Für welches L ist die Entropie maximal? Begründen Sie, dass das Maximum der Entropie in unserem Modell (alle Konfigurationen haben die gleiche Energie) dem thermodynamischen Gleichgewicht entspricht. (4 Punkte)

In den folgenden Aufgabenteilen soll eine Spannkraft f auf das Gummiband wirken. Das Differential der inneren Energie für ein eindimensionales System mit einer Spannkraft lautet im Allgemeinen

$$dU = TdS + fdL,$$

mit der Temperatur T und der Entropie S .

- Berechnen Sie für gegebene N, L, T die Spannkraft f . Zeigen Sie, dass im Limes für kleines L das Hooke'sche Gesetz gilt. (7 Punkte)
- Bei einer konstanten Spannkraft $f > 0$ wird ein Gummiband mit L_1, T_1 auf $T_2 = \frac{5}{4}T_1$ erwärmt. Wie groß ist die Länge L_2 anhand des Ergebnisses aus (d) für kleines L ? Welches Vorzeichen hat der thermische Ausdehnungskoeffizient? (3 Punkte)

Hinweis: In den Aufgaben (b) bis (e) soll stets die Näherung für $N, n_+, n_- \gg 1$ beibehalten werden!

Lösung:

(a)

$$\Omega = \frac{N!}{n_+!n_-!} = \frac{N!}{n_+!(N-n_+)!} \quad (2 \text{ P})$$

$$\ln \Omega = \ln(N!) - \ln(n_+!) - \ln[(N-n_+)!] \quad (1 \text{ P})$$

Stirling-Formel für $n \gg 1$: $n! = \sqrt{2\pi n}(n/e)^n$, also (1 P)

$$\ln(n!) = \frac{1}{2} \ln(2\pi) + \left(n + \frac{1}{2}\right) \ln n - n \xrightarrow{n \gg 1} n \ln n - n$$

$$\ln \Omega = N \ln N - n_+ \ln n_+ - (N-n_+) \ln(N-n_+) \underbrace{-N + n_+ + (N-n_+)}_{=0} \quad (1 \text{ P})$$

$$= -N \left[\frac{n_+}{N} \ln \frac{n_+}{N} + \left(1 - \frac{n_+}{N}\right) \ln \left(1 - \frac{n_+}{N}\right) \right] \quad (1 \text{ P})$$

(b) $L = (n_+ - n_-)d = (2n_+ - N)d$, somit (1 P)

$$\frac{n_+}{N} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{L}{Nd}\right) \quad (1 \text{ P})$$

Damit lautet die Entropie (mit $x = \frac{L}{Nd}$):

$$S = k_B \ln \Omega = -Nk_B \left[\left(\frac{1+x}{2}\right) \ln \left(\frac{1+x}{2}\right) + \left(\frac{1-x}{2}\right) \ln \left(\frac{1-x}{2}\right) \right] \quad (1 \text{ P})$$

(c) Die Entropie ist maximal bei $L = 0$ (man kann anhand von S aus (b) oder einfacher direkt mit Ω aus (a) argumentieren: der Binomialkoeffizient ist natürlich maximal wenn $n_+ = N/2$). (2 P)

Im thermodynamischen Gleichgewicht ist die freie Energie F minimal. (1 P)

Es ist $F = U - TS$. Da in diesem Fall U konstant ist (alle Konfigurationen haben die gleiche Energie), entspricht das Minimum von F dem Maximum von S . (1 P)

Man beachte, dass nach unserer Definition L der Abstand der Endpunkte ist. Die Ausdehnung $\max_{n < N} \sum_{i=1}^n s_i$ ist etwas schwerer zu berechnen. Diese hat einen statistischen Erwartungswert proportional zu \sqrt{N} .

(d) Für $dU = 0$ (1 P)
(denn in unserem simplen Modell haben alle Konfigurationen die gleiche Energie) gilt:

$$f = -T \frac{\partial S}{\partial L} = -k_B T \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial L} \right) \quad (1 \text{ P})$$

$$= \frac{k_B T}{2d} \ln \left(\frac{Nd + L}{Nd - L} \right) \quad (2 \text{ P})$$

Für kleines L , d.h. $L \ll Nd$, ist in der Taylorentwicklung um $L = 0$

$$\ln\left(\frac{Nd+L}{Nd-L}\right) = \frac{2L}{Nd} + \mathcal{O}(L^2) \quad (2 \text{ P})$$

die führende Ordnung linear, so dass die Spannkraft

$$f = \frac{k_B T}{Nd^2} L \quad (1 \text{ P})$$

linear in L ist (=Hooke'sches Gesetz).

- (e) Für Prozesse bei konstantem f gilt anhand der vorigen Gleichung $TL = \text{konstant}$. Somit ist

$$L_2 = \frac{T_1}{T_2} L_1 = \frac{4}{5} L_1 \quad (2 \text{ P})$$

Folglich wird das Gummiband bei Erwärmung kürzer = negativer Ausdehnungskoeffizient. (1 P)

4. Fermionische Vielteilchenzustände

(Summe: 17 Punkte)

- (a) Gegeben seien 3 Ein-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, $\psi_3(x)$ (alle vorhandenen Quantenzahlen sollen bereits durch den Index der Wellenfunktion berücksichtigt sein). Geben Sie explizit eine unter Teilchen-Austausch vollständig antisymmetrische 3-Teilchen-Wellenfunktion $\Psi(x_1, x_2, x_3)$ an. (3 Punkte)
- (b) Zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Fermionen existieren in einem System mit 3 Orbitalen (Ein-Teilchen-Zustände) mit den Energien $\varepsilon_1 = 0$, $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \Delta$ (Spin-Entartung ist hier jeweils außerdem zu berücksichtigen). Wie viele Zwei-Teilchen-Zustände stehen dem System zur Verfügung? Wie lautet die kanonische Zustandssumme? (6 Punkte)
- (c) Wir betrachten weiter das System aus (b). Berechnen Sie die Entropie in Abhängigkeit von der Temperatur. Welchen Grenzwert hat S für $T \rightarrow 0$ und $T \rightarrow \infty$? Berechnen Sie außerdem den Erwartungswert der Energie für beliebige Temperatur und dessen Grenzwert für $T \rightarrow \infty$. (8 Punkte)

Lösung:

- (a) Entweder mit der Summe über alle Permutationen,

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{\hat{P}} (-1)^{|\hat{P}|} \hat{P} [\psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \psi_3(x_3)] ,$$

oder mit der Slater-Determinante:

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_2(x_1) & \psi_3(x_1) \\ \psi_1(x_2) & \psi_2(x_2) & \psi_3(x_2) \\ \psi_1(x_3) & \psi_2(x_3) & \psi_3(x_3) \end{pmatrix} \quad (1 \text{ P})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}} [\psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \psi_3(x_3) + \psi_1(x_3) \psi_2(x_1) \psi_3(x_2) + \psi_1(x_2) \psi_2(x_3) \psi_3(x_1) - \psi_1(x_1) \psi_2(x_3) \psi_3(x_2) - \psi_1(x_2) \psi_2(x_1) \psi_3(x_3) - \psi_1(x_3) \psi_2(x_2) \psi_3(x_1)] \quad (2 \text{ P})$$

- (b) Einschließlich des Spins (\uparrow oder \downarrow für Spin- $\frac{1}{2}$ -Fermionen) gibt es 6 Ein-Teilchen-Zustände. (1 P)

Die Anzahl N_2 der Zwei-Teilchen-Zustände ist die Anzahl an Möglichkeiten, ohne Berücksichtigung der Reihenfolge 2 aus 6 Zuständen zu wählen, also

$$N_2 = \binom{6}{2} = \frac{6!}{2!(6-2)!} = 15 \quad (2 \text{ P})$$

Von den 15 Zuständen hat 1 Zustand die Energie $2\varepsilon_1 = 0$ (beide Fermionen im Grundzustand), 6 Zustände haben die Energie $2\varepsilon_2 = 2\Delta$ (Möglichkeiten, 2 aus 4 Zuständen zu wählen) und die übrigen 8 Zustände haben die Energie $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \Delta$. (2 P)

Die kanonische Zustandssumme lautet daher

$$Z(\beta) = 1 + 8e^{-\beta\Delta} + 6e^{-2\beta\Delta} \quad (1 \text{ P})$$

- (c)

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{\partial}{\partial T} k_B T \log (1 + 8e^{-\beta\Delta} + 6e^{-2\beta\Delta}) \quad (1 \text{ P})$$

$$= k_B \log (1 + 8e^{-\beta\Delta} + 6e^{-2\beta\Delta}) + 4 \frac{\Delta}{T} \frac{2e^{-\beta\Delta} + 3e^{-2\beta\Delta}}{1 + 8e^{-\beta\Delta} + 6e^{-2\beta\Delta}} \quad (2 \text{ P})$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} S(T) = 0 \quad (1 \text{ P})$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} S(T) = k_B \ln(15) \quad (1 \text{ P})$$

Energieerwartungswert:

$$\langle E \rangle = U = F + TS = 4\Delta \frac{2e^{-\beta\Delta} + 3e^{-2\beta\Delta}}{1 + 8e^{-\beta\Delta} + 6e^{-2\beta\Delta}} \quad (2 \text{ P})$$

$$\xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{4}{3} \Delta \quad (1 \text{ P})$$