

## Übungen zur Vorlesung *Thermodynamik und Statistik*

(WiSe 2017/18, Übungsblatt 3)

<http://www.uni-oldenburg.de/condmat/teaching/statistik/>

**Abgabe:** Montag, 6. November bis 12:00 Uhr

### 9) Zur „Energieunschärfe“ im mikrokanonischen Ensemble

Ein mol eines Gases aus  $H_2$ -Molekülen sei bei der Temperatur  $T = 300$  K in einem Kubus mit dem Volumen  $V = 22.4 \ell$  eingesperrt. Behandeln Sie dieses Gas als ein System nicht-wechselwirkender quantenmechanischer „Teilchen im Kasten“. Wie hoch sind dann typische Anregungszustände, d.h. charakteristische Quantenzahlen? — Angenommen, man könnte die Quantenzahlen eines jeden Teilchens bis auf  $\pm 1$  genau festlegen. Wie groß ist dann (ungefähr) die mikrokanonische Energieschalendicke  $\Delta E$ ? Wie groß ist der Fehler, den man begeht, wenn man bei der Berechnung des Phasenraumvolumens diese Energieschale durch eine Vollkugel ersetzt? **(2P)**

### 10) Das Zwei-Zustands-Modell

Ein System bestehe aus zwei Subsystemen. Jedes dieser Subsysteme bestehe aus  $N$  Teilchen, die einen von zwei Zuständen annehmen können: Den Grundzustand mit der Energie  $E_T = 0$ , oder einen angeregten Zustand mit der Energie  $E_T = \varepsilon$ . Beide Subsysteme können Energie austauschen, sind jedoch insgesamt isoliert. Das Gesamtsystem besitze die Energie  $E = k\varepsilon$ , wobei  $k = 0, 1, \dots, 2N$  eine ganze Zahl ist. Die Anzahl seiner Mikrozustände ist daher

$$\Omega_{\text{ges}}^{(k)} = \sum_{\ell=0}^{\min(k,N)} \Omega_1(\ell) \Omega_2(k - \ell),$$

wobei  $\Omega_1(\ell)$  bzw.  $\Omega_2(k - \ell)$  die Anzahl der Mikrozustände des Subsystems 1 bzw. 2 bezeichnet, wenn dieses  $\ell$  bzw.  $k - \ell$  angeregte Teilchen enthält.

a) Bestimmen Sie für  $N \gg 1$  denjenigen Wert  $\ell_{\text{max}}$  von  $\ell$ , der die meisten Realisierungen besitzt, im Rahmen der üblichen Maximumnäherung. Zeigen Sie weiter, dass der Temperaturparameter  $\tau$ , der durch

$$\frac{1}{\tau} = \left. \frac{d}{d\ell} \ln \Omega_1(\ell) \right|_{\ell_{\text{max}}}$$

definiert wird, für beide Subsysteme den gleichen Wert annimmt. Drücken Sie dann den „mittleren Anregungsgrad“  $\ell_{\text{max}}/N$  durch  $\tau$  aus.

b) Zeigen Sie, dass derselbe Temperaturparameter  $\tau$  — ohne die Einteilung in zwei Subsysteme und die damit verbundene Maximumnäherung — auch dem Gesamtsystem zuzuordnen ist. Warum kann  $\tau$  sogar *negativ* werden? **(3P)**

## 11) Quantenmechanische Oszillatoren als mikrokanonisches Ensemble

Betrachten Sie ein isoliertes System aus  $N \gg 1$  unterscheidbaren quantenmechanischen harmonischen Oszillatoren, die alle die gleiche Oszillatorfrequenz  $\omega$  haben. Die Energie des  $i$ -ten Oszillators beträgt also  $E_i = \hbar\omega(n_i + 1/2)$ ; die Gesamtenergie  $E$  des Systems lautet

$$E = \sum_{i=1}^N E_i = \hbar\omega \sum_{i=1}^N \left( n_i + \frac{1}{2} \right) .$$

Die Gesamtenergie  $E$  wird somit durch die Gesamtzahl  $n = \sum_{i=1}^N n_i$  der „Anregungsquanten“ festgelegt.

Berechnen Sie die Entropie  $S(E)$  dieses Oszillatorsystems aus der Anzahl  $\Omega(E)$  der Realisierungen für einen Zustand der Energie  $E$  und ermitteln Sie daraus den Zusammenhang zwischen Energie und Temperatur: Zeigen Sie, dass

$$\frac{E}{N} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} .$$

Was erhält man daraus in den Grenzfällen  $k_B T \gg \hbar\omega$  sowie  $k_B T \ll \hbar\omega$ ?

Hinweis: Die Anzahl der Möglichkeiten,  $n$  „Quanten“ auf  $N$  unterscheidbare Oszillatoren zu verteilen, ist gleich der Anzahl der Möglichkeiten,  $(N - 1)$  Trennstriche zwischen  $n$  in einer Reihe angeordneten Punkten zu zeichnen — warum? **(3P)**

## 12) Zum Umgang mit partiellen Ableitungen

Um die in der Thermodynamik häufig vorkommenden Variablenwechsel übersichtlich zu bewältigen, bedient man sich gerne eines formalen Kalküls. Die folgende Aufgabe erklärt zwei wesentliche Beziehungen, die in diesem Rahmen immer wieder benutzt werden.

a) Es sei  $z(x, y)$  eine Funktion, deren Variablen  $x$  und  $y$  selbst wieder Funktionen von  $u$  und  $v$  sind:  $x = x(u, v)$  und  $y = y(u, v)$ . Daher kann  $z$  auch als Funktion von  $u$  und  $v$  angegeben werden; man schreibt in nachlässiger, aber einprägsamer Weise  $z = z(x, y) = z(x(u, v), y(u, v)) = z(u, v)$ . Zeigen Sie zunächst

$$\left( \frac{\partial z}{\partial u} \right)_v = \left( \frac{\partial z}{\partial x} \right)_y \left( \frac{\partial x}{\partial u} \right)_v + \left( \frac{\partial z}{\partial y} \right)_x \left( \frac{\partial y}{\partial u} \right)_v$$

und folgern Sie dann daraus

$$\left( \frac{\partial z}{\partial y} \right)_x \left( \frac{\partial y}{\partial z} \right)_x = 1 \quad , \quad \left( \frac{\partial x}{\partial z} \right)_y \left( \frac{\partial y}{\partial x} \right)_z \left( \frac{\partial z}{\partial y} \right)_x = -1 .$$

b) Welche beiden bekannten Sätze der Analysis verbergen sich hinter diesen formalen Ausdrücken? **(2P)**