4. Rechenübung aus Statistischer Physik (Lösung)

1. (a)

$$H < E \leftrightarrow 0 < z < \frac{1}{mg}\left(E - \frac{p^2}{2m}\right)$$

Das Phasenraumvolumen ist die Fläche zwischen der Parabel $(E - p^2/(2m))/(mg)$ und der $z = 0$ Achse.

$$\Phi(E) = \int_{-\sqrt{2mE}}^{\sqrt{2mE}} \frac{1}{mg}\left(E - \frac{p^2}{2m}\right) dp = \frac{4\sqrt{2}}{3g\sqrt{m}} E^{3/2}$$

(b) Anzahl der Zustände

$$\Omega(E) = \frac{1}{h}\Omega_V(E) = \frac{1}{h}\frac{d\Phi(E)}{dE}\Delta = \frac{2\sqrt{2}}{gh\sqrt{m}} E^{1/2}\Delta$$

($\Omega_V(E)$: Volumen der Energieschale, $\Omega(E)$: Anzahl der Zustände)

(c) Entropie

$$S = k_B \ln \Omega = k_B \ln\left(\frac{2\sqrt{2}}{gh\sqrt{m}} E^{1/2}\Delta\right)$$

Temperatur des Systems

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{k_B}{2E}$$

Energie

$$E = \frac{1}{2} k_B T$$

2. (a) Die Hamiltonfunktion des gesamten Systems (eines Gases)

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{p_{x,i}^2 + p_{y,i}^2}{2M} + \frac{L_i^2}{2I} + \frac{p_{r,i}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}K(r_i - r_0)^2.\right].$$

Das Phasenraumvolumen ist

$$\begin{aligned}
\Phi(E) &= \int_{H<E} d^N\vec{r}_1 d^N\vec{r}_2 d^N\vec{p}_1 d^N\vec{p}_2 \\
&= \int_{H<E} d^N\vec{R} d^N\vec{r} d^N\vec{p}_R d^N\vec{p}_r \\
&\quad \text{(Transformation zu den Schwerpunkts- und Relativkoordinaten)} \\
&= \int_{H<E} d^N\vec{R} d^N\vec{p}_R d^N r d^N\theta d^N p_r d^N L \\
&\quad \text{(Transformation zu den Polarkoordinaten)} \\
&= (2\pi)^N V^N \int_{H<E} d^N\vec{p}_R d^N r d^N p_r d^N L \\
&\quad \text{(Integration nach } \vec{R} \text{ und } \theta\text{, die Variable unabhängig von } H \text{ sind)}
\end{aligned}$$

Koordinatentransformation :

$$X_j = \frac{p_{x,i}}{\sqrt{2M}} \quad (j = 1, N)$$

$$
\begin{aligned}
X_j &= \frac{p_{y,i}}{\sqrt{2M}} \quad (j = N+1, 2N) \\
X_j &= \frac{L_i}{\sqrt{2I}} \quad (j = 2N+1, 3N) \\
X_j &= \frac{p_{r,i}}{\sqrt{2\mu}} \quad (j = 3N+1, 4N) \\
X_j &= \frac{r_i - r_0}{\sqrt{2/K}} \quad (j = 4N+1, 5N)
\end{aligned}
$$

Hamiltonfunktion

$$H = \sum_{j=1}^{5N} X_j^2$$

und das Volumenelement

$$d^N \vec{p}_R d^N r d^N p_r d^N L = 2^{5N/2} M^N \left(\frac{\mu I}{K}\right)^{N/2} d^{5N} X \,.$$

Das Phasenraumvolumen ist

$$
\begin{aligned}
\Phi(E) &= (2\pi)^N V^N 2^{5N/2} M^N \left(\frac{\mu I}{K}\right)^{N/2} \underbrace{\int_{X_1^2+X_2^2+\cdots+X_{5N}^2<E} d^{5N} X}_{\text{Volumen einer } 5N\text{-dimensionalen Kugel}} \\
&= (2\pi)^N V^N 2^{5N/2} M^N \left(\frac{\mu I}{K}\right)^{N/2} \frac{\pi^{5N/2} E^{5N/2}}{\Gamma(5N/2+1)} \\
&= V^N M^N \left(\frac{\mu I}{K}\right)^{N/2} \frac{(2\pi)^{7N/2} E^{5N/2}}{\Gamma(5N/2+1)}
\end{aligned}
$$

(b) Wenn $N \gg 1$, $\Omega_V(E) \simeq \Phi(E)$.

$$\Omega(E) = \frac{1}{2N! h^{4N}} \Omega_V(E) \simeq \frac{1}{2N! h^{4N}} \Phi(E) = \frac{1}{2N! h^{4N}} V^N M^N \left(\frac{\mu I}{K}\right)^{N/2} \frac{(2\pi)^{7N/2} E^{5N/2}}{\Gamma(5N/2+1)}$$

Druck des Systems

$$P = k_B T \frac{\partial}{\partial V} \ln \Omega = \frac{1}{V} N k_B T \,.$$

Hinweis :

$$\ln \Omega = N \ln V + \underbrace{\ln \left(\frac{1}{2N! h^{4N}} M^N \left(\frac{\mu I}{K}\right)^{N/2} \frac{(2\pi)^{7N/2} E^{5N/2}}{\Gamma(5N/2+1)} \right)}_{\text{unabhängig von } V}$$

Zusätzliche Information

Transformation der Koordinaten

Hamiltonfunktion für ein zweiatomiges Molekül :

$$H = \sum_{j=1}^{2} \frac{p_{x,j}^2 + p_{y,j}^2}{2m} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

($V(r) = (1/2)K(r-r_0)^2$: Wechselwirkung zwischen zwei Atomen).
Schwerpunkts- und Relativkoordinaten:

$$\begin{cases} \vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \\ \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \end{cases}, \quad \begin{cases} \vec{p}_R = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \\ \vec{p}_r = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \end{cases}.$$

Hamiltonfunktion in den Schwerpunkts- und Relativkoordinaten:

$$H = \frac{|\vec{p}_R|^2}{2(2m)} + \frac{|\vec{p}_r|^2}{2(m/2)} + V(|\vec{r}|)$$

Polarkoordinaten für die Relativbewegung :

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} r\cos\theta \\ r\sin\theta \end{pmatrix}, \quad \vec{p}_r = \begin{pmatrix} p_r\cos\theta - (L/r)\sin\theta \\ p_r\sin\theta + (L/r)\cos\theta \end{pmatrix}$$

Hamiltonfunktion in den neuen Koordinaten

$$H = \frac{|\vec{p}^R|^2}{4m} + \frac{p_r^2}{m} + \frac{L^2}{mr^2} + \frac{1}{2}K(r-r_0)^2$$

Taylorentwicklung des Zentrifugalpotentials

$$\frac{L^2}{2mr^2} = \frac{L^2}{2mr_0^2} - \frac{L^2}{mr_0^3}(r-r_0) + O((r-r_0)^2)$$

Wenn $\frac{L^2}{mr_0^3}(r-r_0) \ll (K/2)(r-r_0)^2$,

$$H \simeq \frac{|\vec{p}_R|^2}{2M} + \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2I} + \frac{1}{2}K(r-r_0)^2$$

wobei $M = 2m$, $\mu = m/2$ und $I = (1/2)mr_0^2$. Die Transformation des Koordinatensystems von $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2)$ zu $(\vec{R}, \{r, \theta\}, \vec{p}_R, \{p_r, L\})$ ist kanonisch, d.h.

$$d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{p}_1 d\vec{p}_2 = d\vec{R} d\vec{r} d\vec{p}_R d\vec{p}_r = d\vec{R} d\vec{p}_R dr d\theta dp_r dL$$