

# Lösungen zum 6. Tutorium VU Statistische Physik I, 01.06.2018

## 1. Vibrationen im Wasserstoffmolekül

Betrachten Sie eine Gas aus Wasserstoffmolekülen bei der Temperatur  $T = 300$  K. Bei niedrigen Anregungsenergien kann die Bindung der beiden Wasserstoffatome im Wasserstoffmolekül durch ein harmonisches Potential  $V(R) = \alpha(R - R_0)^2$  approximiert werden, wobei  $R_0 = 0.074$  nm den Gleichgewichtsabstand bezeichnet und  $\alpha$  die Stärke der Bindung beschreibt. Experimentell findet man eine Schwingungsfrequenz von  $f = 130$  THz.

- a) Berechnen Sie die mittlere kinetische Energie pro Teilchen sowie die mittlere Schwingungsenergie pro Teilchen.

### Lösung:

Der Mittelwert der kinetischen Energie eines Moleküls ergibt mithilfe des Äquipartitionstheorems

$$\frac{\langle E_{\text{kin}} \rangle}{N} = \frac{3}{2} k_B T = 0.039 \text{ eV.}$$

Unter Vernachlässigung der Rotations-Vibrations-Kopplung (konstantes Trägheitsmoment) ergibt sich für die mittlere Schwingungsenergie (kinetische plus potentielle Energie)

$$\frac{\langle E_{\text{vib}} \rangle}{N} = k_B T = 0.026 \text{ eV.}$$

- b) Laut Quantenmechanik können die Schwingungszustände des Wasserstoffmoleküls nur diskrete Energien  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  annehmen. Die Wahrscheinlichkeit  $w(E_n)$  den Schwingungszustand mit Energie  $E_n$  zu finden ist  $w(E_n) \propto \exp(-\beta E_n)$ . Berechnen Sie die mittlere Schwingungsenergie pro Teilchen erneut mithilfe der Quantenmechanik.

### Lösung:

Die Wahrscheinlichkeit den Schwingungszustand mit Energie  $E_n$  zu finden ist gegeben durch

$$w(E_n) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}$$

wobei

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}.$$

Die mittlere Schwingungsenergie ergibt sich damit zu

$$\begin{aligned} \frac{\langle E_{\text{vib}} \rangle}{N} &= \sum_{n=0}^{\infty} E_n w(E_n) = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} \\ &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} = 0.27 \text{ eV} + 5 \times 10^{-10} \text{ eV} \end{aligned}$$

Der Freiheitsgrad ist eingefroren und trägt nicht zur spezifischen Wärmekapazität bei. Nur die Nullpunktschwingung liefert einen temperaturunabhängigen Beitrag.

## 2. Vagabundierender Planet im interstellaren Gas

Zwischen den Sternen einer Galaxie befindet sich interstellares Gas. Nehmen Sie an, dass es sich dabei um ideales Gas aus Wasserstoffatomen mit Masse  $m_p$  und Temperatur  $T$  handelt.

- a) Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme eines Teilchens  $Z_1$  im leeren Raumvolumen  $V$ .

**Lösung:**

Die kanonische Zustandssumme ist gegeben durch

$$Z_1 = \frac{1}{h^3} \int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d^3q d^3p = V \left( \frac{2m\pi}{h^2\beta} \right)^{\frac{3}{2}}$$

- b) Zeigen Sie, dass mit der Fugazität  $z$  die großkanonische Zustandssumme allgemein geschrieben werden kann als  $Z_{\text{GK}} = e^{zZ_1}$ . Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit  $N$  Teilchen im Raumvolumen  $V$  zu finden, sowie mittlere Teilchenanzahl  $\langle N \rangle$  in Abhängigkeit von  $Z_1$  und  $z$ .

**Lösung:**

Die großkanonische Zustandssumme ununterscheidbarer nicht-wechselwirkender Teilchen lässt sich mit

$$Z_{\text{K}} = \frac{1}{N!} Z_1^N$$

allgemein schreiben als

$$Z_{\text{GK}} = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_{\text{K}} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} z^N Z_1^N = e^{zZ_1}.$$

Damit ergibt sich die Wahrscheinlichkeit  $N$  Teilchen im Raumvolumen  $V$  zu finden

$$w(N) = \frac{1}{Z_{\text{GK}}} \frac{1}{N!} (zZ_1)^N = \frac{1}{N!} \langle N \rangle^N e^{-\langle N \rangle}$$

mit der mittlere Teilchenanzahl  $\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} z Z_1 = z Z_1$ .

- c) Die Anwesenheit eines vagabundierenden Planeten im Raumvolumen  $V$  werde durch das einfache Gravitationspotential

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\phi_p & \mathbf{r} \in V_p \\ 0 & \mathbf{r} \notin V_p \end{cases}$$

beschrieben, wobei das Volumen  $V_p \in V$  den Einflussbereich des Planeten beschreibt und  $\phi_p$  eine Konstante ist. Berechnen Sie das Verhältnis  $\langle N \rangle' / \langle N \rangle$  zwischen mittlerer Teilchenanzahl im Raumvolumen  $V$  mit Planeten  $\langle N \rangle'$  und ohne Planeten  $\langle N \rangle$ .

**Lösung:**

Die kanonische Zustandssumme für das Volumen mit Planeten ist gegeben durch

$$Z_1' = \frac{1}{h^3} \int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} d^3q d^3p = ((V - V_p) + e^{\beta m_p \phi_p} V_p) \left( \frac{2m\pi}{h^2\beta} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Damit ergibt sich das Verhältnis

$$\frac{\langle N \rangle'}{\langle N \rangle} = \frac{Z_1'}{Z_1} = 1 + (e^{\beta m_p \phi_p} - 1) \frac{V_p}{V}$$

### 3. Absorptionsstellen in Graphen

Die Elektronen in Graphen haben aufgrund der speziellen Bandstruktur eine lineare Energie-Impuls-Beziehung  $E = v_F |\mathbf{p}|$  und können daher als pseudo-relativistisches **zweidimensionales** Gas beschrieben werden, wobei die Fermi-Geschwindigkeit  $v_F \approx 10^6$  m/s an die Stelle der Lichtgeschwindigkeit tritt. Machen Sie die Annahme, dass es sich bei den Elektronen um klassische Teilchen handelt.

- a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme  $Z_1$  eines Teilchens, das sich in der Fläche  $A$  bewegt, sowie die Fugazität  $z$  als Funktion der Temperatur  $T$  und der mittleren Teilchendichte  $n = \langle N \rangle / A$ .

**Lösung:**

Die kanonische Zustandssumme ist gegeben durch

$$Z_1 = \frac{1}{h^2} \int e^{-\beta v_F |\mathbf{p}|} d^2q d^2p = \frac{2\pi A}{h^2} \int_0^\infty p e^{-\beta v_F p} dp = \frac{2\pi A}{h^2 \beta^2 v_F^2}$$

und damit

$$\langle N \rangle = z Z_1 = \frac{z 2\pi A}{h^2 \beta^2 v_F^2}.$$

Daraus folgt

$$z = \frac{n h^2 v_F^2}{2\pi k_B^2 T^2}.$$

- b) Innerhalb der Graphenflocke sei eine Absorptionsstelle an die sich ein Elektron mit Absorptionsenergie  $e_0$  binden kann. Berechnen Sie die Besetzungswahrscheinlichkeit der Absorptionsstelle als Funktion der Temperatur  $T$  und der mittleren Teilchendichte  $n$ .

**Hinweis:** Die Absorptionsstelle und das Elektronengas befinden sich im Gleichgewicht. Daher stimmt das chemische Potential und die Temperatur in beiden Systemen überein.

**Lösung:**

Die Absorptionsstelle ( $e_0 < 0$ ) hat nur einen Energiezustand,  $Z_1 = e^{-\beta e_0}$ , und kann nur ein Teilchen aufnehmen. Damit ergibt sich die großkanonische Zustandssumme

$$Z_{\text{GK}} = \sum_{N=0}^1 \frac{1}{N!} z^N Z_1^N = 1 + z e^{-\beta e_0}.$$

Die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen zu finden (Besetzungswahrscheinlichkeit) ist gegeben durch

$$w(N=1) = \frac{1}{Z_{\text{GK}}} \frac{1}{1!} (z Z_1)^1 = \frac{z e^{-\beta e_0}}{1 + z e^{-\beta e_0}} = \frac{n h^2 v_{\text{F}}^2}{n h^2 v_{\text{F}}^2 + 2 \pi k_{\text{B}}^2 T^2 e^{\beta e_0}}$$

#### 4. Vorbereitung auf die Quantenstatistik

Gegeben sei die Dichtematrix

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 - a \\ 1/2 - a & 1/2 \end{pmatrix}$$

eines Dipols in der Basis  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ . Der Dipole kann im Magnetfeld  $B$  nur die beiden diskreten Werte  $\{+\mu, -\mu\}$  annehmen.

- a) Schreiben Sie die Matrix des Hamiltonoperators  $\hat{H}$  in der  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  Basis an und berechnen Sie die Spur der Matrix  $e^{-\beta H}$ . Für welche Werte von  $a$  kommutieren  $H$  und  $\rho$ .

**Lösung:**

Die Matrix des Hamiltonoperators ist

$$H = \begin{pmatrix} -\mu B & 0 \\ 0 & \mu B \end{pmatrix}$$

und

$$\text{Spur}(e^{-\beta H}) = e^{-\beta \mu B} + e^{\beta \mu B} = 2 \cosh(\beta \mu B).$$

Der Kommutator zwischen  $\rho$  und  $H$  ist

$$[\rho, H] = \begin{pmatrix} 0 & +\mu B - 2a\mu B \\ -\mu B + 2a\mu B & 0 \end{pmatrix}$$

und verschwindet nur für  $a = \frac{1}{2}$ .

- b) Berechnen Sie den Erwartungswert der Energie  $\langle E \rangle = \text{Spur}(H\rho)$ , sowie die Entropie  $S = -k_B \text{Spur}(\rho \ln \rho)$ . Für welchen Wert von  $a$  wird die Entropie maximal? Zeigen Sie, dass es sich dabei um einen gemischten Zustand handelt.

**Lösung:**

Der Erwartungswert der Energie ist

$$\langle E \rangle = \text{Spur}(H\rho) = \frac{1}{2}(-\mu B + \mu B) = 0$$

und die Entropie ist gegeben durch

$$S = -k_B \text{Spur}(\rho \ln \rho) = -k_B \left( (1-a) \ln(1-a) + a \ln(a) \right).$$

Dessen Maximum liegt bei

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -k_B \left( -\ln(1-a) + \ln(a) \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad a = \frac{1}{2}.$$

Dabei handelt es sich um einen gemischten Zustand da

$$\text{Spur}(\rho) - \text{Spur}(\rho^2) = \frac{1}{2} \neq 0.$$

Zu kreuzen (online im **TUWEL**-Kurs zur LVA): 1/2/3a/3b/4