17 Gibbs Paradoxon

Ohne den Faktor $1/N!$ für ununterscheidbare Teilchen lautet das Phasenraumvolumen für $H(\underline{q}, \underline{p}) \leqslant E$ im idealen Gas mit N Teilchen im Volumen V

$$\Phi(E) = \frac{V^N}{h^{3N}} \frac{(2\pi m E)^{\frac{3N}{2}}}{(3N/2)!}.$$

Der verbleibende Term $(3N/2)!$ kommt von der Gamma-Funktion für das Volumen der $3N$ dimensionalen Kugel und N sei gerade. Zeigen Sie, dass mit obigem Phasenraumvolumen folgender Prozess eine nichtverschwindende Entropieänderung hat: zwei isolierte Teilsysteme mit dem gleichen Gas und $E_1 = E_2, V_1 = V_2, N_1 = N_2$ werden miteinander verbunden und können sich mischen. Das Gesamtsystem bleibt isoliert.

18 e-Ink

Wir betrachten eine e-Ink Anzeige bestehend aus N kleinen Kugeln. Eine Hälfte jeder Kugel ist schwarz, die andere weiß. Jede Kugel sei ein unverschiebbarer aber frei drehbarer elektrischer Dipol mit Dipolmoment $d_0 \hat{\boldsymbol{q}}_n$ in einem externen elektrischen Feld $E_0 \hat{\boldsymbol{z}}$. Wir nehmen an, dass die Hamiltonfunktion nur von den Richtungsvektoren der Dipole $\hat{\boldsymbol{q}}_n$ abhängt:

$$H(\underline{q}) = -E_0 d_0 \sum_{n=1}^{N} \hat{\boldsymbol{z}} \cdot \hat{\boldsymbol{q}}_n \qquad \text{mit } \underline{q} = (\hat{\boldsymbol{q}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{q}}_N) \text{ und } |\hat{\boldsymbol{q}}_n| = 1.$$

Die Abhängigkeit von den Drehimpulsen vernachlässigen wir, da wir nur an konfigurationsabhängigen Erwartungswerten $A(\underline{q})$ interessiert sind.

(a) Zeigen Sie, dass die kanonische Zustandssumme über den Konfigurationsraum gegeben ist durch

$$Z(\beta, E_0, N) = \int d^{3N} q \prod_{n=1}^{N} \delta\left(|\boldsymbol{q}_n| - 1\right) \exp\{-\beta H(\underline{q})\} = \left(\frac{4\pi \sinh(\beta E_0 d_0)}{\beta E_0 d_0}\right)^N.$$

Warum fehlt der Faktor $1/N!$ in der Zustandssumme?

(b) Um einen beliebigen konfigurationsabängigen Ensemble-Erwartungswert

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(\beta, E_0, N)} \int d^{3N} q \prod_{n=1}^{N} \delta\left(|\boldsymbol{q}_n| - 1\right) A(\underline{q}) \exp\{-\beta H(\underline{q})\}$$

zu berechnen, können wir eine parametrisierte Hamiltonfunktion einführen $H_\lambda(\underline{q}) = H(\underline{q}) + \lambda A(\underline{q})$ mit dem frei wählbaren Parameter λ. Zeigen Sie, dass der Erwartungswert $\langle A \rangle$ dann mit Hilfe der λ-parametrisierten Zustandssumme $Z_\lambda(\beta, E_0, N)$ für diese Hamiltonfunktion durch

$$\langle A \rangle = -\frac{1}{\beta} \left.\frac{\partial \log(Z_\lambda(\beta, E_0, N))}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0}$$

gefunden werden kann.

(c) Benutzen Sie die Methode aus (b) um den Erwartungswert der durchschnittlichen Ausrichtung in z-Richtung, $\langle z \rangle$, mit $z(\underline{q}) = \sum_n \hat{\boldsymbol{z}} \cdot \hat{\boldsymbol{q}}_n / N$ zu finden, der angibt, wie schwarz oder weiß die Pixel wirklich sind, wenn sie mit der elektrischen Feldstärke $\pm E_0$ angesteuert werden. Zeigen Sie $\langle z \rangle = \coth(\beta E_0 d_0) - (\beta E_0 d_0)^{-1}$ und skizzieren Sie $\langle z \rangle$ als Funktion von $\beta E_0 d_0$.

19 Atome in einer Röhre

In einer engen Röhre der Länge L sind N gleiche Atome der Masse m eingesperrt. Unter Vernachlässigung der Ausdehnung der Atome im Vergleich zur Länge der Röhre lautet die Hamiltonfunktion $H(\underline{q}, \underline{p}) = \sum_{n=1}^{N} p_n^2/2m$ mit $\underline{p} = (p_1, \ldots, p_N)$ und $\underline{q} = (q_1, \ldots, q_N)$. Die Atome können sich nur in einer Dimension entlang der Röhrenachse bewegen und nicht Platz tauschen. Sie sind in einer festen Ordnung $0 \leqslant q_1 \leqslant q_2 \leqslant \ldots \leqslant q_N \leqslant L$ und daher wohlunterscheidbar.

(a) Skizzieren Sie den Integrationsbereich von $\int_{0\leqslant q_1 \leqslant q_2 \leqslant L} d^2q$ für den Fall $N = 2$ und zeigen Sie anhand der Skizze, dass das Integral äquivalent ist zu $\int_0^{q_2} dq_1 \int_0^L dq_2$ oder $\int_0^L dq_1 \int_{q_1}^L dq_2$.

(b) Zeigen Sie, dass sich für die Atome in der Röhre folgende kanonische Zustandssumme ergibt

$$Z(\beta, L, N) = \frac{1}{h^N} \int d^N p \int_0^{q_2} dq_1 \int_0^{q_3} dq_2 \ldots \int_0^L dq_N \exp\{-\beta H(\underline{q}, \underline{p})\} = \frac{1}{N!} \left(L\sqrt{2\pi m/\beta h^2}\right)^N,$$

also die gleiche wie für das eindimensionale ideale Gas aus ununterscheidbaren Teilchen, die frei Platz tauschen können.
Hinweis: Berechnen Sie das Integral $\int_0^{q_2} dq_1 \int_0^{q_3} dq_2 \ldots \int_0^L dq_N$ von links nach rechts.

20 Magnetische Kugeln

Wir betrachten $N = 4$ ununterscheidbare magnetische Kugeln auf $V = 4$ Feldern. Die Position der n-ten Kugel sei vollständig durch die Angabe der Feldnummer $q_n \in \{1, \ldots, 4\}$ bestimmt und wir vernachlässigen deren Impulsbeiträge. Bis zu 4 Kugeln können jedoch das gleiche Feld besetzten und einen magnetisch verbundenen Cluster bilden. Jedes verbundene Paar von Kugeln hat die Bindungsenergie U. Die Hamiltonfunktion ist diskret und lautet

$$H(\underline{q}) = -U \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=n+1}^{N} \delta_{q_n q_m} \quad \text{mit } \underline{q} = (q_1, \ldots, q_N), q_n \in \{1, \ldots, V\}$$

und dem Kronecker-Delta $\delta_{ij} = 1$ für $i = j$ und 0 sonst.

(a) Skizzieren Sie alle 5 Möglichkeiten, die Kugeln in Cluster einzuteilen und finden Sie zu jeder davon die Anzahl der möglichen Anordnungen, diese Cluster von Kugeln auf die Felder zu verteilen.

(b) Werten Sie die Hamiltonfunktion für jede der 5 Möglichkeiten aus und zeigen Sie damit, dass die kanonische Zustandssumme über den Konfigurationsraum als Funktion von $\xi = \beta U$ gegeben ist durch $4e^{6\xi} + 12e^{3\xi} + 6e^{2\xi} + 12e^{\xi} + 1$.

(c) Zeigen Sie, dass der Erwartungswert der Anzahl an besetzten Feldern $\langle B \rangle$ mit

$$B(\underline{q}) = V - \sum_{i=1}^{V} \prod_{n=1}^{N} (1 - \delta_{iq_n})$$

gegeben ist durch $(4e^{6\xi} + 24e^{3\xi} + 12e^{2\xi} + 36e^{\xi} + 4)/Z(\xi)$. Skizzieren Sie die Funktion und finden Sie den Grenzwert verschwindender magnetischer Bindung $U \to 0$.

Formelsammlung:

$$\int d^3q\, \delta(|\boldsymbol{q}| - 1) = \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \, \sin\vartheta \qquad \text{(Integral über die Einheitssphäre)}$$