Übung 1 für Statistische Mechanik im SS 2016

Prof. Dr. Andreas Klümper
Norman Gundlach (n.gundlach@uni-wuppertal.de F.12.15)
Yahya Öz (y.oez@uni-wuppertal.de G.11.07)

Abgabe: 20.04.2016 Besprechung: 22.04.2016

1. **Thermischer Erwartungswert** (7)
   In der Quantenmechanik wurden Erwartungswerte von Operatoren berechnet durch

   $$\langle \mathbf{A} \rangle = \operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\rho}\mathbf{A}\right).$$

   Hier ist $\boldsymbol{\rho}$ der Dichteoperator. Angenommen es sei

   $$\boldsymbol{\rho} = \sum_{\nu} |\nu\rangle \frac{e^{-\beta E_\nu}}{Z} \langle \nu| \,, \qquad Z = \operatorname{tr}\left(e^{-\beta \mathbf{H}}\right), \qquad \beta = \frac{1}{k_B T},$$

   wobei $\mathbf{H}$ der Hamiltonoperator mit den Eigenwerten E_ν und den Eigenzuständen $|\nu\rangle$ ist.

   (a) Zeige zunächst
   $$\langle \mathbf{H} \rangle = \boldsymbol{\partial}_{-\beta} \ln Z.$$

   (b) Berechne $\langle \mathbf{H} \rangle$ für

      i. ein freies Teilchen.
      ii. den eindimensionalen harmonischen Oszillator im Grenzfall großer Temperatur.
      iii. den starren Rotator im Grenzfall großer Temperatur.
      (Hinweis: Hier ist $\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{L}}^2}{2I}$, wobei $\vec{\mathbf{L}}$ der Drehimpulsoperator und I das Trägheitsmoment der betreffenden Achse ist. Beachte außerdem die $2l+1$ - fache Entartung der Energieeigenwerte.)

2. **Statistisch unabhängige Ereignisse** (5)
   Gegeben seien drei verschiedenfarbige Würfel. Ein Makrozustand sei durch die Angabe der gewürfelten Ziffern charakterisiert, z. B. $\{4, 2, 1\}$. Dieser kann durch verschiedene Mikrozustände (Angabe der Ziffern und der zugehörigen Farben) verwirklicht werden.

   (a) Sind die Mikrozustände gleichwahrscheinlich? Die Makrozustände?

(b) Wie viele Makrozustände gibt es?

Hinweis: Es handelt sich um das Problem, $m = 3$ ununterscheidbare Kugeln auf $n = 6$ Fächer zu verteilen, wobei jedes Fach bis zu drei Kugeln aufnehmen kann. Die Makrozustände sind dann durch geeignete Permutationen von $m + n - 1$ vielen Objekten (die Kugeln und die Trennwände zwischen den Fächern) gegeben.

(c) Gib die Wahrscheinlichkeiten der folgenden Makrozustände i. - v. an.

i. $\{4, 2, 1\}$

ii. $\{1, 1, y\}$ mit $y \neq 1$

iii. $\{x, x, x\}$

iv. $\{x, x, y\}$ mit $x \neq y$

v. $\{x, y, z\}$ mit $x \neq y \neq z \neq x$

Überprüfe, dass die Summe der Wahrscheinlicheiten von iii., iv. und v. gleich eins ist.

3. **Ensemble von 2-Niveau-Systemen** (8)

Betrachte ein Ensemble von N identischen Objekten. Jedes Objekt nimmt mit der Wahrscheinlichkeit p_+ (p_-) den Zustand $+$ ($-$) an. Die p_+, p_- sind statistisch unabhängig. Wir nennen $P_N(n_+)$ die Wahrscheinlichkeit, das Ensemble in einem Zustand mit n_+ Objekten im Zustand $+$ anzutreffen (die Angabe von n_+ definiert einen Makrozustand des Ensembles).

(a) Wie viele Möglichkeiten (Mikrozustände) gibt es, einen solchen Zustand zu realisieren? Leite daraus $P_N(n_+)$ ab. Verifiziere:

$$\sum_{n_+=0}^{N} P_N(n_+) = 1$$

Wie viele Mikrozustände gibt es insgesamt?

(b) Die erzeugende Funktion $\chi_N(\lambda)$ ist definiert durch

$$\chi_N(\lambda) = \sum_{n_+=0}^{N} e^{\lambda n_+} P_N(n_+) \, .$$

Entwickle $\chi_N(\lambda)$ in Potenzen nach λ, ohne die konkrete Form von $P_N(n_+)$ zu berücksichtigen. Welche Bedeutung haben der lineare und der quadratische Term?

(c) Berechne $\chi_N(\lambda)$ explizit mit $P_N(n_+)$ aus Aufgabenteil (a). Gebe unter Verwendung der Ergebnisse aus Teil (b) den Erwartungswert $\bar{n}_+$ und die Standardabweichung $\triangle n_+$ an.

(d) Zeige, dass im Grenzfall $p_+ \ll 1$, $N \gg 1$, Np_+ endlich, eine Poisson-Verteilung resultiert:

$$P_N\left(n_+\right) \longrightarrow \frac{\bar{n}_+^{n_+}}{n_+!} e^{-\bar{n}_+}$$