

Achtung: Die Nachklausur wurde zuerst für den 30. März geplant, muss aber wegen des Feiertags verschoben werden. Der neue Termin wird bald bekanntgegeben.

Thermodynamik und Statistische Mechanik
Abgabetermin: 09.01.2018, 9:00 (Vorlesung)

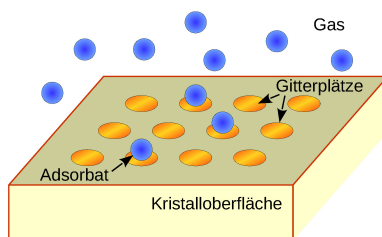
WS 17/18
Prof. Dr. Claudius Gros

Blatt №10

Dr. Vladislav Borisov <borisov@itp.uni-frankfurt.de>

Aufgabe 29 (*Adsorption an einer Oberfläche*)

(8 Pkte.)



Die Oberfläche eines Kristalls bestehe aus N_0 Gitterplätzen und sei im Kontakt mit einem idealen Gas aus Atomen anderer Sorte. Jedes Atom kann von der Oberfläche adsorbiert werden und dabei einen der freien Gitterplätze besetzen. Jeder Gitterplatz ist in der Lage, nur ein einziges Atom aufzunehmen, dessen Bindungsenergie $\epsilon < 0$ ist.

Wenn die Anzahl der besetzten Gitterplätze N deutlich kleiner als die Gesamtzahl N_0 ist, können jegliche Wechselwirkungen zwischen den Adsorbaten vernachlässigt werden. Die adsorbierten Atome und das Gas sind im Gleichgewicht bei der konstanten Temperatur T .

- Bestimmen Sie die erlaubten Energiewerte der Gesamtheit der adsorbierten Atome und den Entartungsgrad jedes Energieniveaus. (1 Pkt.)
- Berechnen Sie die großkanonische Zustandsumme und das großkanonische Potential als Funktion der Temperatur T , der Gesamtzahl der Gitterplätze N_0 und des chemischen Potentials μ . (3 Pkte.)
- Welcher Anteil der Gitterplätze ist bei vorgegebener Temperatur T und chemischem Potential μ besetzt? (2 Pkte.)
- Bestimmen Sie die mittlere Anzahl N der Adsorbaten als Funktion des Druckes P und der Temperatur T des umgebenden Gases. Verwenden Sie dazu das chemische Potential eines idealen Gases: (2 Pkte.)

$$\mu(T, P) = k_B T \ln \left[\frac{P h^3}{(k_B T)^{5/2} (2\pi m)^{3/2}} \right] \quad (1)$$

Aufgabe 30 (*Photonengas*)

(5 Pkte.)

Im Blatt 8 haben wir das Photonengas mithilfe des mikrokanonischen Ensembles behandelt und dabei den Ausdruck für die innere Energie hergeleitet: $E = 3Nk_B T$. Die Anzahl der Teilchen N blieb allerdings unbeachtet. Bei einem Photonengas ist die Teilchenzahl keine Konstante sondern eine Funktion der Temperatur. Im Rahmen des großkanonischen Ensembles ist es möglich, die Wahrscheinlichkeiten unterschiedlicher Teilchenzahlen zu bestimmen und den mittleren Wert $\langle N \rangle$ zu berechnen.

Führen Sie diese Berechnung für das Photonengas aus und bestimmen Sie die Temperaturabhängigkeit der mittleren Teilchenzahl $\langle N \rangle$ und der mittleren inneren Energie $\langle E \rangle$ unter der Annahme, dass das chemische Potential μ null ist. Vergleichen Sie die Ergebnisse mit Aufgabe 15 aus Blatt 5.

Aufgabe 31 (*Reine und gemischte Zustände*)

(7 Pkte.)

In einem dreidimensionalen Hilbertraum werden folgende orthonormierte Zustände definiert: $|\Psi_1\rangle = (1, 0, 0)$, $|\Psi_2\rangle = (0, 1, 0)$ und $|\Psi_3\rangle = (0, 0, 1)$.

- a) Ein System befinde sich in einem gemischten Zustand, wobei die Wahrscheinlichkeiten für die Zustände $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle$ und $|\Psi_3\rangle$ im Verhältnis 3 : 1 : 2 zueinander stehen. Anhand diesen Daten bilden Sie die Dichtematrix $\hat{\rho}$ dieses Systems. (1 Pkt.)
- b) Eine Observable A ist definiert durch den Operator

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 3 & -2 & 0 \\ -2 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle A \rangle$ im gemischten Zustand mit der Dichtematrix $\hat{\rho}$ aus **a**. (2 Pkte.)

- c) Wir betrachten jetzt einen reinen Zustand mit der Wellenfunktion $|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle + c_3|\Psi_3\rangle$. Die Koeffizienten c_i sind reelle Zahlen und entsprechen den gleichen Wahrscheinlichkeiten, den jeweiligen Zustand $|\Psi_i\rangle$ zu messen, wie bei **a**. Bestimmen Sie die Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ und berechnen Sie den Erwartungswert der Observablen A als $\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$. (2 Pkte.)

Vergleichen Sie die Ergebnisse für $\langle A \rangle$ in **b** und **c** und diskutieren Sie den Ursprung ihrer Differenz. (1 Pkt.)

- d) Bilden Sie die Dichtematrix für den reinen Zustand aus **c** und überprüfen Sie die Eigenschaft $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Verifizieren Sie, dass diese Gleichung für den gemischten Zustand aus **a** nicht erfüllt ist. (1 Pkt.)

