2. Klausur zu “Theoretische Physik 5 – Thermodynamik und Statistische Physik”

27. März 2023

Prof. Marc Wagner
Goethe-Universität Frankfurt
Institut für Theoretische Physik

---

5 Aufgaben mit insgesamt **100** Punkten. Die Klausur ist mit **50** oder mehr Punkten bestanden.

Name: ______________________________

Matrikelnummer: ______________________________

Aufgabe	Punkte
1	
2	
3	
4	
5	
Gesamt	
Note	

Aufgabe 1 (1 + 1 + 3 + 4 + 4 + 6 = 19 Punkte)

Betrachte im Rahmen der Thermodynamik ein Gas mit festgehaltener Teilchenzahl N, das z.B. durch die beiden Zustandsvariablen Entropie S und Volumen V beschrieben werden kann.

(a) Gib die Legendre-Transformation an, mit der man aus der Energie $E(S, V)$ die Enthalpie $H(S, P)$ erhält.

(b) Benutze das Ergebnis aus Teilaufgabe (a) sowie $dE = T\,dS - P\,dV$, um dH durch Differentiale der natürlichen Variablen von H auszudrücken?

(c) Welche beiden Beziehungen zwischen Zustandsgrößen und partiellen Ableitungen von H folgen unmittelbar aus dem Ergebnis von Teilaufgabe (b)? Leite daraus die zugehörige Maxwell-Relation ab.

Betrachte nun ebenfalls im Rahmen der Thermodynamik ein ideales Gas, das zu Beginn den Druck $2P_0$ und das Volumen V_0 aufweist. Bei diesem Gas wird dann in Schritt 1 zunächst bei konstant gehaltenem Volumen der Druck halbiert. Danach, in Schritt 2, wird bei konstant gehaltener Temperatur das Volumen verdoppelt.

(d) Fertige ein übersichtliches P-V-Diagramm an, in dem beide Schritte sauber skizziert und die Achsen entsprechend beschriftet sind.

(e) Berechne für Schritt 1 die Änderung der Energie des Gases ΔE_1, die dem Gas zugeführte Wärme ΔQ_1 sowie die am Gas verrichtete Arbeit ΔW_1. Verwende dafür die Zustandsgleichungen sowie den 1. Hauptsatz. Drücke Deine Ergebnisse vollständig durch P_0 und V_0 aus.

(f) Berechne für Schritt 2 die Änderung der Energie des Gases ΔE_2, die dem Gas zugeführte Wärme ΔQ_2 sowie die am Gas verrichtete Arbeit ΔW_2. Verwende dafür die Zustandsgleichungen sowie den 1. Hauptsatz. Drücke Deine Ergebnisse vollständig durch P_0 und V_0 aus.

Lösung 1(a)

$H(S, P) = E(S, V(S, P)) + PV(S, P)$.

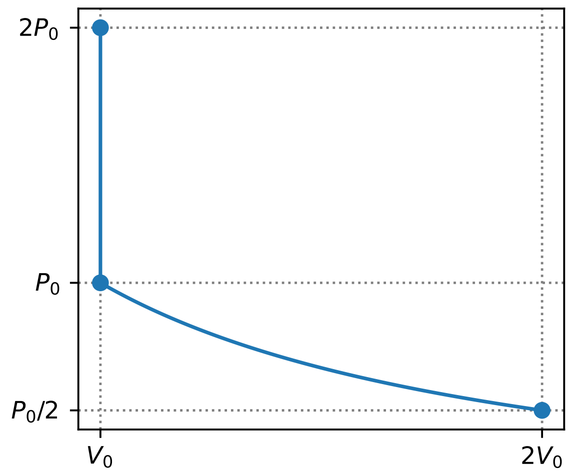
Lösung 1(b)

$dH = dE + d(PV) = T\,dS - P\,dV + V\,dP + P\,dV = T\,dS + V\,dP$.

Lösung 1(c)

$$T = +\left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_P \quad , \quad V = +\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_S \quad , \quad \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P . \tag{1}$$

Lösung 1(d)



Lösung 1(e)

$dW = -P\,dV$. Damit $\Delta W_1 = 0$ und $\Delta E_1 = \Delta Q_1$.

ΔE_1 über kalorische und thermische Zustandsgleichung:

$$\Delta E_1 = \frac{3\nu R(T_f - T_i)}{2} = \frac{3\nu R(P_f - P_i)V_0}{2} = -\frac{3P_0V_0}{2}. \tag{2}$$

Lösung 1(f)

Da $T = \text{const}$ folgt $\Delta E_2 = 0$. Damit $\Delta W_2 = -\Delta Q_2$.

ΔW_2 über Integration:

$$\Delta W_2 = -\int_{V_i}^{V_f} P\,dV = -\int_{V_0}^{2V_0} \frac{\nu RT}{V}\,dV = -\ln(2)\nu RT = -\ln(2)P_0V_0. \tag{3}$$

Aufgabe 2 (14 + 2 + 6 + 2 = 24 Punkte)

Gegeben ist ein System von N ununterscheidbaren nicht-relativistischen Teilchen mit Masse m in 3 Raumdimensionen, die sich im Potential

$V(\mathbf{r}) = \lambda|\mathbf{r}|$

($\lambda > 0$) bewegen. Zwischen den Teilchen gibt es keine Wechselwirkungen. Betrachte dieses System im Folgenden auf klassische Weise, d.h. ohne Verwendung von Quantenmechanik.

(a) Berechne die kanonische Zustandssumme Z sowie deren Logarithmus $\ln(Z)$. Nähere dabei auftretende Fakultäten mit der Stirling-Formel, d.h. $n! \approx (n/e)^n$. Die einzelnen Rechenschritte müssen dabei klar nachvollziehbar sein.
Hinweis: Je nachdem, welchen Rechenweg Du wählst, kann das folgende Integral hilfreich sein,

$$\int dx\, x^2 e^{-ax} = -\frac{e^{-ax}(a^2x^2 + 2ax + 2)}{a^3}.$$

(b) Berechne den Mittelwert der Energie E als Funktion der Temperatur T und der Teilchenzahl N.
Hinweis: Das korrekte Ergebnis für Z aus Teilaufgabe (a) hat die Form

$$Z = \#\left(\frac{1}{\beta^{9/2}\lambda^3}\right)^N,$$

wobei # ein von β und λ unabhängiger Ausdruck ist. Du kannst dieses Ergebnis für die Bearbeitung der Teilaufgaben (b) und (d) verwenden, falls Deine Bemühungen bei Teilaufgabe (a) nicht erfolgreich waren.

(c) Stelle Beziehungen auf, bei denen $\overline{r}$ (Mittelwert von $r = |\mathbf{r}|$) sowie $\overline{r^2}$ (Mittelwert von r^2) jeweils mit geeigneten Ableitungen von $\ln(Z)$ in Verbindung gesetzt werden.

(d) Verwende Deine in Teilaufgabe (c) aufgestellten Beziehungen, um $\overline{r}$ sowie $\overline{r^2}$ als Funktionen von T und λ zu berechnen.

Lösung 2(a)

Kanonische Zustandssumme eines Teilchens:

$$\begin{aligned} Z_1 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d^3p \int d^3r\, e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2m + \lambda|\mathbf{r}|)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\int d^3p\, e^{-\beta\mathbf{p}^2/2m}\right)\left(\int d^3r\, e^{-\beta\lambda|\mathbf{r}|}\right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} 4\pi\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-\beta\lambda r} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} 4\pi\frac{d^2}{d(\beta\lambda)^2}\int_0^\infty dr\, e^{-\beta\lambda r} = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} 4\pi\frac{d^2}{d(\beta\lambda)^2}\frac{1}{\beta\lambda} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} 8\pi\frac{1}{(\beta\lambda)^3}. \end{aligned} \tag{4}$$

Kanonische Zustandssumme (der Einfachheit = auch bei Näherungen durch die Stirling-Formel):

$$Z = \frac{1}{N!}Z_1^N = \left(\frac{eZ_1}{N}\right)^N \tag{5}$$

$$\ln(Z) = N\left(\ln(Z_1) - \ln(N) + 1\right). \tag{6}$$

Lösung 2(b)

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z) = \frac{9N}{2\beta} = \frac{9Nk_BT}{2}. \tag{7}$$

Lösung 2(c)

$$\overline{r} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\lambda}\ln(Z_1) = -\frac{1}{\beta N}\frac{\partial}{\partial\lambda}\ln(Z) \tag{8}$$

$$\overline{r^2} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\lambda}\overline{r} = \frac{1}{\beta^2 N}\frac{\partial^2}{\partial\lambda^2}\ln(Z). \tag{9}$$

Lösung 2(d)

$$\overline{r} = \frac{3}{\beta\lambda} = \frac{3k_BT}{\lambda} \tag{10}$$

$$\overline{r^2} = \frac{3}{(\beta\lambda)^2} = \frac{3(k_BT)^2}{\lambda^2}. \tag{11}$$

Aufgabe 3 (3 + 5 + 10 = 18 Punkte)

Betrachte ein ideales nicht-relativistisches Quantengas, bestehend aus N ununterscheidbaren Teilchen mit Masse m und Spin s, deren Bewegung auf 1 Dimension x eingeschränkt ist, in der das Potential $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ vorliegt.

(a) Gib für Temperatur $T = 0$ die Energie des Gases für Spin $s = 0$ an.

(b) Gib für Temperatur $T = 0$ die Energie des Gases für Spin $s = 1/2$ an (gehe davon aus, dass N eine gerade Zahl ist).

Betrachte nun ein ideales nicht-relativistisches Quantengas, bestehend aus N ununterscheidbaren Teilchen mit Masse m und halbzahligem Spin s in einem kubischen Volumen $V = L^3$.
Zur Klarstellung: Im Gegensatz zu den Teilaufgaben (a) und (b) ist die Bewegung nun nicht mehr auf 1 Dimension beschränkt und es liegt kein Potential vor, abgesehen von den Wänden des kubischen Volumens, die als unendlicher Kasten angesehen werden können.

(c) Bestimme näherungsweise für große N den bei $T = 0$ größten auftretenden Impulsbetrag p_F als Funktion von N und s. Bestimme daraus die Fermi-Energie ϵ_F.

Lösung 3(a)

Bei $T = 0$ sind alle Bosonen im 1-Teilchen-Grundzustand. Damit $E = N\hbar\omega/2$.

Lösung 3(b)

Bei $T = 0$ füllen die Fermionen lückenlos die niedrigen 1-Teilchen-Zustände auf (jeder kann aufgrund von Spin $s = 1/2$ doppelt besetzt werden).

Minimale 1-Teilchen-Energie: $E_{1,\min} = \hbar\omega/2$.

Maximale 1-Teilchen-Energie: $E_{1,\max} = \hbar\omega(N/2 - 1/2)$.

Mittlere 1-Teilchen-Energie: $(E_{1,\max} + E_{1,\min})/2 = N\hbar\omega/4$ (aufgrund der gleichbleibenden Abstände zwischen den Energieniveaus).

Damit $E = N^2\hbar\omega/4$.

Lösung 3(c)

Quantenzahlen sind die diskreten Impulskomponenten $\mathbf{p}$ und die z-Komponente des Spins s_z.

Werte für $\mathbf{p}$ und s_z:
$\mathbf{p} = (\pi\hbar/L)\mathbf{n}$ mit $n_x, n_y, n_z = 1, 2, \ldots, \infty$.
$s_z = -s, -s + 1, \ldots, +s - 1, s$.

Volumen eines 1-Teilchen-Zustands im Impulsraum: $V_1 = (\pi\hbar/L)^3/(2s + 1)$.

Volumen des achten Teils einer Kugel im Impulsraum mit Radius p_F: $V_{p_F} = \pi p_F^3/6$.

Damit näherungsweise

$$\frac{V_{p_F}}{V_1} = \frac{p_F^3(2s + 1)L^3}{6\pi^2\hbar^3} \tag{12}$$

1-Teilchen-Zustände mit $|\mathbf{p}| < p_F$. Wird diese Anzahl mit N identifiziert, entspricht p_F dem größten auftretenden Impulsbetrag bei $T = 0$, da alle energetisch niedrigen Zustände besetzt sind. Damit

$$\begin{aligned} N &= \frac{p_F^3(2s + 1)L^3}{6\pi^2\hbar^3} \\ \rightarrow \quad p_F &= \frac{\pi^{2/3}\hbar(3N)^{1/3}}{(s + 1/2)^{1/3}L} \end{aligned} \tag{13}$$

(das bekannte Ergebnis, das im Skript auf anderem Weg errechnet wurde).

Die Fermi-Energie ergibt sich gemäß

$$\epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{\pi^{4/3}\hbar^2(3N)^{2/3}}{2(s + 1/2)^{2/3}L^2m}. \tag{14}$$

Aufgabe 4 (5 + 7 + 3 + 6 = 21 Punkte)

Betrachte ein Modell nicht-wechselwirkender unterscheidbarer Spins, das durch die Hamilton-Funktion

$$H = -B \sum_{n=0}^{N} s_n$$

beschrieben wird, wobei die N Spinvariablen s_n die Werte -1 oder $+1$ annehmen können.

(a) Drücke die Anzahl $N_\downarrow$ der Spinvariablen mit Werten -1 und die Anzahl $N_\uparrow$ der Spinvariablen mit Werten $+1$ durch die Energie E, den Parameter B und N aus.

(b) Berechne den Logarithmus der mikrokanonischen Zustandssumme und daraus die Entropie. Nähere auftretende Fakultäten mit Hilfe der Stirling-Formel $n! \approx (n/e)^n$.

(c) Wie kann die Temperatur T bei vorliegender Entropie einfach bestimmt werden? Gib einen entsprechenden Ausdruck an, der T und eine Ableitung der Entropie in Beziehung setzt. Wie kann die Magnetisierung $M = \sum_{n=0}^{N} s_n$ bei vorliegender Entropie einfach bestimmt werden? Gib einen entsprechenden Ausdruck an, der M und eine Ableitung der Entropie in Beziehung setzt.

(d) Berechne die inverse Temperatur $\beta = 1/k_B T$ als Funktion von E/B mit Hilfe des von Dir in Teilaufgabe (c) angegebenen Ausdrucks. Welche Symmetrieeigenschaft bezüglich E/B besitzt β und was sind die maximalen und minimalen Werte von E/B, für die β definiert ist? Diskutiere das Vorzeichen der Temperatur T in Abhängigkeit von E/B.

Lösung 4(a)

$N = N_\downarrow + N_\uparrow$ sowie $E = H$.

Außerdem

$$N_\uparrow - N_\downarrow = \sum_{n=0}^{N} s_n = -\frac{E}{B}. \tag{15}$$

Damit

$$2N_\downarrow - N = +\frac{E}{B} \quad \rightarrow \quad N_\downarrow = \frac{1}{2}\left(N + \frac{E}{B}\right) \tag{16}$$

$$2N_\uparrow - N = -\frac{E}{B} \quad \rightarrow \quad N_\uparrow = \frac{1}{2}\left(N - \frac{E}{B}\right). \tag{17}$$

Lösung 4(b)

$$\Omega(E,B) = \frac{N!}{N_\downarrow! N_\uparrow!} \approx \frac{N^N}{N_\downarrow^{N_\downarrow} N_\uparrow^{N_\uparrow}}. \tag{18}$$

Ab jetzt $=$ statt $\approx$:

$$\begin{aligned} \ln(\Omega(E,B)) &= N\ln(N) - N_\downarrow \ln(N_\downarrow) - N_\uparrow \ln(N_\uparrow) = \\ &= N\ln(N) - \frac{1}{2}\left(N + \frac{E}{B}\right)\ln\left(\frac{1}{2}\left(N + \frac{E}{B}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(N - \frac{E}{B}\right)\ln\left(\frac{1}{2}\left(N - \frac{E}{B}\right)\right). \end{aligned} \tag{19}$$

$S(E,B) = k_B \ln(\Omega(E,B))$.

Lösung 4(c)

Bekannt aus der Vorlesung:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S(E,B)}{\partial E}. \tag{20}$$

B ein äußerer Parameter. Die zugehörige verallgemeinerte Kraft ist gemäß der in der Vorlesung eingeführten Definition

$$dW_{\mathrm{qs}} = -\sum_j X_j \, dx_j \tag{21}$$

gerade die Magnetisierung M. Damit kann die ebenfalls in der Vorlesung diskutierte grundlegende Beziehung

$$X_j = T\frac{\partial S(E,\mathbf{x})}{\partial x_j} \tag{22}$$

verwendet werden, die

$$M = T\frac{\partial S(E,B)}{\partial B} \tag{23}$$

ergibt.

Lösung 4(d)

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{k_B T} &= \frac{1}{k_B}\frac{\partial S(E,B)}{\partial E} = \\
&= -\frac{1}{2B}\ln\left(\frac{1}{2}\left(N+\frac{E}{B}\right)\right) - \frac{1}{2B} + \frac{1}{2B}\ln\left(\frac{1}{2}\left(N-\frac{E}{B}\right)\right) + \frac{1}{2B} = \\
&= \frac{1}{2B}\ln\left(\frac{N-E/B}{N+E/B}\right)
\end{aligned} \tag{24}
$$

β ist punktsymmetrisch um den Ursprung, kommt bei $E/B = -N$ von $+\infty$, hat bei $E/B = 0$ einen Nulldurchgang und geht bei $E/B = +N$ zu $-\infty$. Die Temperatur wird damit negativ für $E/B > 0$.

Aufgabe 5 (8 + 6 + 4 = 18 Punkte)

(a) Gib für ideale Quantengase die Bose-Einstein-Verteilung und die Fermi-Dirac-Verteilung, d.h. die Mittelwerte der Besetzungszahlen $\overline{n_r}$ für Bosonen und Fermionen an (r bezeichnet einen Satz geeigneter 1-Teilchen-Quantenzahlen; $r = 0$ soll dabei dem 1-Teilchen-Grundzustand entsprechen). Die von Dir angegebenen Ausdrücke sollen von der Temperatur T (oder äquivalent $\beta = 1/k_B T$), dem chemischen Potential μ und den 1-Teilchen-Energien ϵ_r abhängen. Skizziere beide Verteilungen im gleichen Diagramm als Funktionen von $\beta(\epsilon_r - \mu)$. Welche Einschränkungen an den Wertebereich für μ existieren für Bosonen beziehungsweise Fermionen? Gib sowohl die Bose-Einstein-Verteilung als auch die Fermi-Dirac-Verteilung, d.h. die Besetzungszahlen $\overline{n_r}$ für den Spezialfall $T = 0$ an.

(b) Skizziere das Phasendiagramm von Wasser in der T-P-Ebene, wie in der Vorlesung diskutiert. Erläutere anhand dieser Skizze die folgenden Begriffe:

- Phase.
- Diskreter Phasenübergang, Phasengrenze.
- Kritischer Punkt.
- Tripelpunkt.

(c) Zeige, dass die Wahrscheinlichkeit des Auftretens eines Mikrozustands mit Energie E in einem System A proportional zu $e^{-\beta E}$ ist, wenn dieses System A an ein unendlich großes System B gekoppelt ist, in dem Temperatur $T = 1/k_B\beta$ vorliegt (d.h. bei B handelt es sich um ein Wärmebad).

Lösung 5(a)

Bose-Einstein-Verteilung:

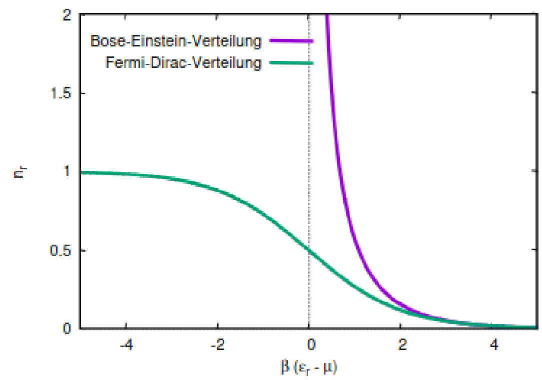
$$\overline{n_r} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_r - \mu)} - 1}.$$

Einschränkung für μ für Bosonen: $\mu < \epsilon_0$.

Fermi-Dirac-Verteilung:

$$\overline{n_r} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_r - \mu)} + 1}.$$

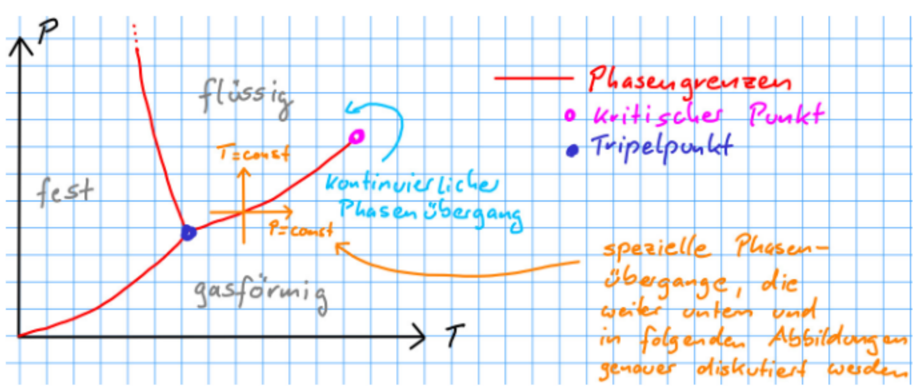
Keine Einschränkung für μ für Fermionen.



Spezialfall $T = 0$:

- Bosonen: $\overline{n_0} = N$, alle anderen $\overline{n_r} = 0$.
- Fermionen: $\overline{n_r} = \Theta(\mu - \epsilon_r)$.

Lösung 5(b)



- Phase: Typischerweise durch einen Ordnungsparameters charaktierisiert. Verschiedene Phasen unterschieden sich durch qualitativ verschiedenes, makroskopisches Verhalten. Innerhalb einer Phase sind physikalische Eigenschaften homogen.

- Diskreter Phasenübergang: Eine Linie im Phasendiagramm (Phasengrenze) wird überschritten.
- Kritischer Punkt: Ende einer Phasengrenze
- Tripelpunkt: Drei Phasengrenzen treffen aufeinander.

Lösung 5(c)

Siehe Skript, Abschnitt 1.13:

$$P \propto \Omega_B(E_{\text{ges}} - E) \tag{25}$$

$$\begin{aligned}
&\ln(\Omega_B(E_{\text{ges}} - E)) = \\
&\quad = \ln(\Omega_B(E_{\text{ges}})) - \underbrace{\left.\frac{\partial \ln(\Omega_B(E'))}{\partial E'}\right|_{E'=E_{\text{ges}}}}_{=\beta} E + \underbrace{\frac{1}{2}\,\underbrace{\frac{\partial}{\partial E'}\left.\frac{\partial \ln(\Omega_B(E'))}{\partial E'}\right|_{E'=E_{\text{ges}}}}_{=0} E^2 + \ldots}_{=0} = \\
&\quad = \text{const} - \beta E.
\end{aligned} \tag{26}$$

Damit $P \propto e^{-\beta E}$.