Institut für
Theoretische Physik
Prof. Dr. W. Strunz
PD Dr. G. Plunien

**Thermodynamik + Statistik WS 10/11**

*http://tu-dresden.de/physik/tqo/lehre*

**10. Übung**

1. **Entropische Ungleichungen:**

   Wir untersuchen weitere Eigenschaften der Entropie $S(\rho) = -k_B \mathrm{Tr}(\rho \ln \rho)$ als Maß für die "Unkenntnis" des Mikrozustands bei gegebenem Dichteoperator $\rho$.

   a) Zeigen Sie, dass für zwei Dichteoperatoren $\rho$, $\rho'$ gilt:

   $$\mathrm{Tr}[\rho(\ln \rho' - \ln \rho)] \leq 0.$$

   [Hinweis: $\ln z \leq z - 1$.]

   b) Zeigen Sie unter Verwendung von a), dass für alle Dichtematrizen $\rho$ mit $\mathrm{Tr}\rho = 1$ und $\mathrm{Tr}(\rho \hat{H}) = E$ gilt: $S(\rho) \leq S(\rho_K)$ ($\rho_K = \exp(-\beta \hat{H})/Z_K$ das kanonische Ensemble).

   c) Zeigen Sie analog, dass für alle Dichtematrizen $\rho$ mit $\mathrm{Tr}\rho = 1$, $\mathrm{Tr}(\rho \hat{H}) = E$ und $\mathrm{Tr}(\rho \hat{N}) = N$ gilt: $S(\rho) \leq S(\rho_{GK})$ ($\rho_{GK} = \exp(-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}))/Z_{GK}$ das großkanonische Ensemble).

   d) Sei $\rho$ ein Dichteoperator im Produkt-Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ und $\rho_1 \equiv \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_2}(\rho)$ bzw. $\rho_2 \equiv \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_1}(\rho)$ die reduzierten Dichteoperatoren in $\mathcal{H}_1$ bzw. $\mathcal{H}_2$. Zeigen Sie unter Verwendung von a), dass $S(\rho_1) + S(\rho_2) \geq S(\rho)$. Wann gilt Gleichheit?

2. **Virialsatz:**

   Betrachten Sie ein System mit $f$ Freiheitsgraden, das durch eine Hamiltonfunktion $H(q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f)$ beschrieben wird. Dabei sei die potentielle Energie $V = V(q_1, \ldots, q_f)$.

   a) Zeigen Sie durch Zeitmittelung entlang der Phasenraumtrajektorien:

   $$\overline{E_{\mathrm{kin}}} = -\frac{1}{2}\overline{\sum_{i=1}^{f} q_i F_i},$$

   wobei die kinetische Energie $E_{\mathrm{kin}}$ eine homogene Funktion vom Grad 2 in den Impulsen sei und $F_i$ die generalisierte Kraft $-\frac{\partial H}{\partial q_i}$ bezeichnet.

   b) Zeigen Sie, daß sowohl bei Mittelung über ein mikrokanonisches Ensemble wie auch bei Mittelung über ein kanonisches Ensemble gilt:

   $$\left\langle \xi_i \frac{\partial H}{\partial \xi_j} \right\rangle = \delta_{ij} k_B T,$$

   wobei $\xi_i = q_i$ für $i \in \{1, ..., f\}$ und $\xi_i = p_{i-f}$ für $i \in \{f+1, ..., 2f\}$ ist.

*– bitte wenden –*

c) Benutzen Sie das Resultat aus $b$), um zu zeigen, daß bei mikrokanonischer und kanonischer Rechnung gilt:

$$\langle E_{\text{kin}} \rangle = -\frac{1}{2} \left\langle \sum_{i=1}^{f} q_i F_i \right\rangle .$$

d) Zeigen Sie, daß die rechte Seite der letzten Gleichung proportional zur mittleren potentiellen Energie ist, wenn die potentielle Energie eine homogene Funktion vom Grad $\alpha$ in den Koordinaten ist.

3. **Ideales (Quanten-)Gas in einer Kugel:**

Ein ideales Gas (Teilchenzahl $N$), das in einer Kugel (Radius $R$) eingeschlossen ist, soll quantenmechanisch behandelt werden (z.B. Schrödinger-Gleichung mit sphärischem Potentialtopf $U(r) = U_0 \Theta(r - R)$ mit $U_0 \to \infty$).

Der Radialteil der Einteilchen-Wellenfunktion $\psi_{n\ell m}(r, \vartheta, \varphi)$ ist durch die sphärische Besselfunktion $j_\ell(kr)$ gegeben (wieso?), deren Nullstellen $\{x_{n\ell} = k_{n\ell} R,\ n = 1, 2, \ldots,\ \ell = 0, 1, 2, \ldots\}$ als bekannt vorausgesetzt werden können. Ein $N$-Teilchenmikrozustand $a$ wird durch einen Satz von $3N$ Quantenzahlen $a = \{(n_1, \ell_1, m_1), (n_2, \ell_2, m_2), \ldots, (n_N, \ell_N, m_N)\}$ beschrieben.

Bestimmen Sie für diese spezielle Geometrie den Druck $p = -\overline{\frac{\partial E_a(V)}{\partial V}}$ als Funktion der Energie $E$ und des Volumens $V$.