

Aufgabe 14.1 Klassische statistische Mechanik und Bohr-van Leeuwen Theorem

Ein Zeitevolution eines Systems mit N Teilchen ist in der klassischen statistischen Mechanik gegeben durch eine Hamiltonfunktion $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, welche von den (verallgemeinerten) Koordinaten $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) = (q_1, \dots, q_f)$ und den dazugehörigen (verallgemeinerten) Impulsen $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = (p_1, \dots, p_f)$ abhängt ($f = 3N$ sind die Anzahl der Freiheitsgrade im System).

In der klassischen statistischen Mechanik definiert man die (kanonische) Zustandssumme $Z(T, V, N)$ als

$$Z(T, V, N) = \frac{1}{N! h^f} \int_{\mathbb{R}^f} d^f p \int_{\Omega^N} d^f q e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})}, \quad (1)$$

wobei die Ortsintegration auf die Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ mit dem Volumen $|\Omega| = V$ beschränkt wird und $\beta = (k_B T)^{-1}$ die inverse Temperatur bezeichnet (Boltzmann-Konstante k_B). Die Konstante h besitzt der Einheit einer Wirkung. Der Faktor $N!$ wird für identische Teilchen benötigt, damit kein Gibbssches Paradoxon auftritt.

Die freie Energie ist dann gegeben durch

$$F(T, V, N) = -k_B T \log Z(T, V, N). \quad (2)$$

1. Berechne die Zustandssumme $Z(T, V, N)$ für das ideale Gas mit

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N \mathbf{p}_j^2. \quad (3)$$

Berechne ausserdem F , U , c_V , p und μ .

Hinweis: Führe die thermische Länge $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ ein.

2. Berechne die Zustandssumme $Z(T, V, N, \mathbf{A}(\mathbf{q}))$ für Teilchen mit der Ladung e in einem zeitunabhängigen Magnetfeld $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$. Die Hamiltonfunktion lautet nun

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N \left[\mathbf{p}_j - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{q}_j) \right]^2 + U(\mathbf{q}). \quad (4)$$

Beachte, dass hier die räumliche Einschränkung auf das Volumen V explizit durch die potentielle Energie $U(\mathbf{q})$ (z.B. Kastenpotential) gegeben ist. Wie hängt die freie Energie von dem angelegten Magnetfeld \mathbf{B} /dem angelegten Vektorpotential \mathbf{A} ab? Was kann man daraus für den Magnetismus in der klassischen Mechanik schliessen? Das Resultat ist unter dem Namen ‘Bohr-van Leeuwen Theorem’ bekannt.

Hinweis: Die Magnetisierung ist gegeben durch $\mathbf{M} = \langle -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{B}} \rangle = k_B T \frac{\partial}{\partial \mathbf{B}} \log Z$.

Aufgabe 14.2 Quantenstatistik der Rotationen eines Diatomischen Moleküls

Ziel dieser Aufgabe ist es, den Anteil der rotatorischen Freiheitsgrade an der spezifischen Wärme eines Gases aus zweiatomigen Molekülen zu finden. Hierzu nehmen wir an, dass wir die beiden Atome des Moleküls als Punktteilchen betrachten können. Wir separieren dann

das Problem der Bewegung der zwei Atome in Relativ- und Schwerpunktskoordinaten. Das Schwerpunktsproblem interessiert uns nicht (es liefert den kinetischen Anteil an c_V), währenddem das Relativproblem äquivalent zum Einteilchenproblem mit der reduzierten Masse $m^* = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ ist. Wir nehmen nun an, dass die beiden Atome die gleiche Masse haben aber trotzdem unterscheidbar sind (wieso ist dies eine Vereinfachung?).

- a) Begründe, weshalb der Hamiltonian, den wir für das Rotationsproblem betrachten müssen, durch

$$\mathcal{H} = \frac{L^2}{2I} \quad (5)$$

gegeben ist, wobei L der Drehimpulsoperator und $I = mr_0^2/2$ gerade das Trägheitsmoment des Moleküls ist, mit r_0 dem Abstand der Atome.

- b) Finde nun mit dem Hamiltonian (5) die spezifische Wärme c_V der Rotationen für kleine und grosse Temperaturen, indem du zuerst die Zustandssumme approximativ berechnest.

Hinweis: Aus der Quantenmechanik kennen wir das Spektrum von \mathcal{H} : Die Energien $\hbar^2 l(l+1)/2I$ sind $(2l+1)$ -fach entartet.