Zentralübung

Thermodynamik und Statistische Physik (T4)

Lösungsskizze Blatt 10

WiSe 2019/20

Aufgabe 1: Adsorption

Laut Hinweis, betrachten wir die Oberfläche als ein großkanonisches Ensemble. Wenn n Plätze besetzt sind, haben wir $E_n = -n\epsilon$ und $\binom{N_0}{n}$ Möglichkeiten. Dann ist die großkanonische Zustandssumme

$$Z_G = \sum_{\text{Zustände}} e^{-\beta(E_n - \mu n)} = \sum_n^{N_0} \binom{N_0}{n} e^{\beta n(\epsilon+\mu)} = (e^{\beta(\epsilon+\mu)} + 1)^{N_0}.$$

Der Bedeckungsgrad ist

$$\begin{aligned} f\big(T, \mu(p,T)\big) &= \frac{\langle n \rangle}{N_0} = \frac{1}{N_0 Z_G} \sum_n n e^{-\beta(E_n - \mu n)} = \frac{1}{\beta N_0} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_G \\ &= \frac{e^{\beta(\epsilon+\mu)}}{e^{\beta(\epsilon+\mu)} + 1} = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\epsilon+\mu)}}. \end{aligned}$$

Um die (p,T)-Abhängigkeit explizit anzugeben, benutzen wir dass im Gleichgewicht

$$\mu = \mu_{\text{id.Gas}}.$$

Es gilt, dass

$$Z_G^{\text{id. Gas}} = \exp\left(\tfrac{V e^{\beta\mu}}{\lambda^3}\right),$$

wo $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}}$ die *thermische Wellenlänge* ist. Das großkanonische Potential des idealen Gases ist $F_G = -kT \ln Z_G = -kT \frac{V e^{\beta\mu}}{\lambda^3}$. Somit ist

$$p = -\frac{\partial F_G}{\partial V} = \frac{kT e^{\beta\mu}}{\lambda^3} \quad \Longrightarrow \quad \mu(p,T) = kT \ln\left(\tfrac{p\lambda^3}{kT}\right).$$

Einsetzen im Bedeckungsgrad liefert

$$f(p,T) = \frac{1}{1 + \frac{kT}{p\lambda^3(T)} e^{-\epsilon/kT}}.$$

Aufgabe 2: von Neumann Gleichung

a) Die Zeitentwicklung des Zustands $|\psi\rangle$ wird durch die Schrödinger Gleichung beschrieben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle, \qquad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi| = \langle\psi| \hat{H}.$$

Wir haben dann,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}(|\psi\rangle\langle\psi|) = (\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle)\langle\psi| + |\psi\rangle \frac{\partial}{\partial t}(\langle\psi|) \\ &= -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi\rangle\langle\psi| + \frac{i}{\hbar}|\psi\rangle\langle\psi|\hat{H} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \rho]. \end{aligned}$$

Im klasischen Limes ($\hbar \to 0$) haben wir

$$\begin{aligned} \text{Dichtematrix } \hat{\rho} &\mapsto \rho \text{ Wahrscheinlichkeitsverteilung auf Phasenraum} \\ \hat{H} &\mapsto H \\ -\frac{i}{\hbar}[\cdot,\cdot] &\mapsto \{\cdot,\cdot\}_{\text{P.B.}} + \mathcal{O}(\hbar) \\ \text{Komposition } \hat{f} \circ \hat{g} &\mapsto f \star g = f \cdot g + \mathcal{O}(\hbar) \text{ (Moyal-)Produkt} \end{aligned}$$

und die von Neumann Gleichung wird genau zur Liouville Gleichung abgebildet.

b) Wir müssen den Kommutator $[\hat{H}, \hat{\rho}]$ ausrechnen:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \sim [(a^\dagger a + \tfrac{1}{2}), |n\rangle \langle n|] = [a^\dagger a, |n\rangle \langle n|] = 0.$$

Der letzte Schritt ist in der Basis $\{|m\rangle\}_{m\in\mathbb{N}}$ zu sehen:

$$a^\dagger a\,|m\rangle = m\,|m\rangle\,, \qquad (|n\rangle \langle n|)\,|m\rangle = \delta_{nm}\,|m\rangle$$

also sind beide Operatoren *diagonal*, und daher auch dessen Kommutator trivial.

Bei Fragen E-Mail an *tabler.alexander@physik.uni-muenchen.de*