Übung Nr. 11

Diskussionsthema: Identische Teilchen in der Quantenmechanik

34. Eindimensionales Gas

Sei ein Gas aus N identischen Molekülen, die sich nur entlang der eindimensionalen Strecke $[0, L]$ bewegen können. Dieses Gas ist verdünnt, so dass quantenmechanische Effekte vernachlässigbar sind. Die potentielle Energie für die Wechselwirkung zwischen zwei Molekülen, deren Entfernung $|x|$ beträgt, ist eine Funktion $V(|x|)$ mit einem abstoßenden „harten Kern" bei kleinen Abständen und einem anziehenden Teil bei größeren Abständen, dessen Reichweite kurz bleibt:

$$V(x) \begin{cases} \to \infty & \text{für } |x| < a \\ < 0 & \text{für } a < |x| < b \\ = 0 & \text{für } b < |x|, \end{cases}$$

mit $b - a$ klein gegen a. Die gesamte potentielle Energie ist die Summe der potentiellen Energien für alle Paare von Molekülen.

i. Zeigen Sie, dass die kanonische Zustandssumme $Z_N(T, L)$ für das Gas sich als

$$Z_N(T, L) = \frac{\zeta^N}{N!} Q_N(T, L)$$

umschreiben lässt, mit $Q_N(T, L)$ einem Integral über die Ortskoordinaten der N Moleküle und ζ einem zu bestimmenden Parameter. Wählen Sie die Normierung so, dass Q_N sich in Abwesenheit von Wechselwirkung zu L^N reduziert.

ii. Zeigen Sie, dass die Annahmen über V es erlauben, $Q_N(T, L)$ in die Form

$$Q_N(T, L) = N! \int_{\mathcal{D}_N} \exp\left[-\frac{V(x_N - x_{N-1}) + \cdots + V(x_2 - x_1)}{k_B T}\right] \mathrm{d}x_1 \cdots \mathrm{d}x_N$$

umzuschreiben, mit $\mathcal{D}_N$ dem durch $0 < x_1 < \ldots < x_{N-1} < x_N < L$ definierten Bereich in $\mathbb{R}^N$.

iii. Um weitere Ergebnisse zu erhalten, ist es günstiger, das isotherm-isobare Ensemble zu benutzen, dessen Zustandssumme durch

$$Z_{\text{ii}}(T, \mathcal{P}) = \frac{1}{L_0} \int_0^\infty Z_N(T, L)\, \mathrm{e}^{-\mathcal{P}L/k_B T}\, \mathrm{d}L$$

gegeben ist, mit L_0 einer Konstante.
Das zugehörige thermodynamische Potential $G_N(T, \mathcal{P}) = -k_B T \ln Z_{\text{ii}}(T, \mathcal{P})$ ist die freie Enthalpie.

Drücken Sie die Zustandssumme $Z_{\text{ii}}(T, \mathcal{P})$ durch das Integral

$$\mathcal{I}(T, \mathcal{P}) = \int_0^\infty \exp\left[-\frac{V(y) + \mathcal{P}y}{k_B T}\right] \mathrm{d}y$$

aus. Folgern sie daraus die freie Enthalpie (vernachlässigen Sie dabei die nicht-extensiven Terme).
Hinweis: Betrachten Sie die Variablenänderung $x_1, \ldots, x_N; L \to y_1, \ldots, y_N; \ell$ mit

$$y_1 = x_1, \quad y_2 = x_2 - x_1, \quad \ldots, \quad y_N = x_N - x_{N-1}; \quad \ell = L - x_N.$$

iv. Bestimmen Sie die Zustandsgleichung $\mathcal{P}(T, L)$ im besonderen Fall, wo das Potential V sich zu seinem harten Kern reduziert. Interpretieren Sie das Ergebnis.

35. Zwei identische Teilchen im Kastenpotential

Zwei identische Teilchen befinden sich in einem eindimensionalen Kastenpotential mit unendlich hohen Potentialwänden

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst.} \end{cases}$$

i. Wie lauten die Energieeigenwerte und die Eigenfunktionen in Ortsdarstellung für ein Teilchen im Kastenpotential?

ii. Formulieren Sie den Hamilton-Operator des Zweiteilchensystems. Warum separieren die Eigenfunktionen in einen Orts- und einen Spinanteil?

iii. Bei den beiden Teilchen handele es sich um Fermionen mit Spin $s = \frac{1}{2}$. Welche Symmetrie muss der Ortsanteil der Eigenfunktion haben, wenn der Spinanteil durch $S = 1$ beschrieben wird und welche Symmetrie muss der Ortsanteil der Eigenfunktion haben, wenn der Spinanteil durch $S = 0$ beschrieben wird? Berechnen Sie für beide Fälle die möglichen Energieeigenwerte und Eigenfunktionen.

iv. Bei den beiden Teilchen handele es sich nun um Bosonen mit Spin $s = 1$. Welche Symmetrie muss der Ortsanteil der Eigenfunktion haben, wenn der Spinanteil durch $S = 2$, $M = 2$ beschrieben wird? Berechnen Sie für diesen Fall die möglichen Energieeigenwerte und Eigenfunktionen.

Frohe Weihnachtsfeiertage und einen guten Rutsch!