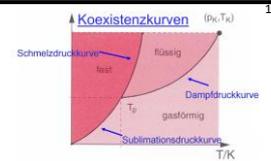


Statistische Physik I

03.07.2018

Flüssigkeiten und Gase

Ideales Gas, therm. Zustglgch $p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = \frac{Nk_B T}{V} \Rightarrow pV = Nk_B T = nRT$	$R = N_A k_B; N = nN_A$
Betrachtung auf Teilchenebene	
Mittlere kinetische Energie $\bar{E}_{kin} = \frac{f}{2} k_B T = \frac{m}{2} \bar{v}^2$	Mittleres Geschw. quadrat $\bar{v}^2 = \int_0^\infty v^2 f(v) dv = \frac{3k_B T}{m}$
Kalorische Zustandsgl. $E_{kin} = \frac{1}{2} k_B T$ (pro FG); $\bar{E} = F + TS = T - T \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{f}{2} Nk_B T$ (N Teilchen)	
Gibbs'sche Phasenregel: $F = 2 + K - P$	
Reale Gase (Van-der-Waals-Gleichung) Ehrenfest: Sprung in n-ter Abl. des Ordnungsparameters (z.B Dichte): Phasenüberg. n-ter Ordnung	
$\left(p + \frac{N^2 a}{V^2}\right)(V - Nb) = Nk_B T$	a ... Stoffkonstante $b = 4N_A V_a = 4N_A \frac{4\pi}{3} r_a^3$
Krit. Temp.: $T_k = \frac{8a}{27Rb}$	Krit. Druck $p_k = \frac{a}{27b^2}$
Krit. Vol.: $V_k = 3b$	Oberh. der kritischen Temp. kann Gas nicht verflü. werden
Kalorische Zustandsgleichung: $E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{f}{2} RT - \frac{a}{V}$	Molare Schmelzw. $\Delta_{schm} = T \frac{dp}{dT} (V_{fl} - V_{fest})$
Boyle Temp. $T_b = \frac{a}{bR}$	Bei T_b verh. sich Gas annähernd ideal



Thermodynamik

¹⁾ Abb. aus: Wolfgang Demtröder (2105): Experimentalphysik 1. Mechanik und Wärme. 7. Auflage. Springer, 2015S. 215.

0. Hauptsatz	• Wenn A und B im therm. Gleichgewicht und B und C im Gleichgewicht, dann ist auch A mit C im thermischen Gleichgewicht.		
1. Hauptsatz	• Jedes System besitzt eine innere Energie E (extensive Zustandsgröße). Diese kann sich nur über den Transport von mechanischer Arbeit W und Wärme Q über die Systemgrenzen ändern. • Die innere Energie E eines isolierten Systems ist erhalten • Die innere Energie eines Systems ändert sich genau in dem Maß, in dem Energie zugeführt oder entzogen wird.		
2. Hauptsatz	• Einem makroskopischen System im Gleichgewicht kann eine Entropie S zugeordnet werden, für die gilt: o S ist eine extensive Zustandsfunktion. o Bei reversibler Transformation ($\oint \delta S = 0$) gilt: $dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T}$ (mit $1/T$ als integrierenden Faktor) • Die Entropie eines isolierten Systems kann nie abnehmen. Jeder Prozess läuft so lange ab, bis die Entropie maximal wird. • Es gibt keine Zustandsänderung, deren einziges Ergebnis die Übertragung von Wärme von einem Körper niedriger auf einen Körper höherer Temperatur ist. • Es gibt keine Wärmekraftmaschine, die bei gegebenen mittleren Temperaturen der Wärmezufuhr und Wärmeabfuhr einen höheren Wirkungsgrad hat als den aus diesen Temperaturen gebildeten Carnot-Wirkungsgrad.		
3. Hauptsatz	• Nernst: Es ist nicht möglich, ein System bis zum absoluten Nullpunkt abzukühlen.		
Fundamentalgleichung 1.HS	$dE = \delta Q + \delta W$ $dE = TdS - p dV + \mu dN$	δ : unvollst. Diff. dE ... Zunahme innere Energie δQ ... zugeführte Wärme δW ... zugeführte Arbeit	E ... Zustandsgröße Q ... keine Zustandsgröße W ... keine Zustandsgröße Zugeführte Wärme \Rightarrow Erhöhung Enthalpie $H=U+pV$
Isochor $V=const.$	$\delta W = 0 \Rightarrow dE = \delta Q$ $(dE)_V = \delta Q = n c_v dT$	$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{f}{2} N_A k_B = \frac{f}{2} R$... spez. Molwärmel _V	$\frac{p_2}{p_1} = \frac{T_2}{T_1}$ Zugeführte Wärme \Rightarrow Erhöhung von $U \propto Q \propto T$
isobar $p=const.$	$(dH)_p = \delta Q = dE - \delta W = n c_v dT + p dV = n c_v dT + nR dT$	$c_p = \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_p = c_v + R = \frac{f}{2} R + R$	$\frac{V_2}{V_1} = \frac{T_2}{T_1}$ $\Delta W = \int_{V_1}^{V_2} p dV = p(V_2 - V_1) = nR(T_2 - T_1)$ Zugeführte Wärme \Rightarrow Erhöhung der Enthalpie $H=E+pV$
isotherm $T=const.$	$dE = 0$ (bei i.G. $dU \propto dT$) $\delta Q = -\delta W$	$\Delta W = Nk_B T \ln \frac{V_2}{V_1} = Nk_B T \ln \frac{p_2}{p_1}$	$p_1 V_1 = p_2 V_2$ Zugeführte Wärme \Rightarrow Arbeit
adiabat. $\delta Q=0$	$\delta Q = 0$ $dE = \delta W$ $S = const.$ (wenn reversibel)	$TV^{\kappa-1} = const.$ $pV^\kappa = const.$ $\kappa = \frac{c_p}{c_v} = \frac{f+2}{f}$	$\Delta W_{ad} = \frac{Nk_B}{\kappa-1} (T_2 - T_1)$ $\frac{T_1}{T_0} = \left(\frac{V_0}{V_1}\right)^{\kappa-1} = \left(\frac{p_1}{p_0}\right)^{1-\frac{1}{\kappa}}$
polytrop	$pV^n = const.$; $n = 0$... isobar; $n = 1$... isotherm; $n \rightarrow \infty$... isochor; $n = \kappa$... adiabat	$\Delta Q = mc_v \frac{n-\kappa}{n-1} (T_2 - T_1)$	
2. HS	$\eta = \frac{ \Delta W }{Q_{zugef}} = 1 - \frac{T_k}{T_w} < 1$	Energie = Exergie + Anergie $\Delta Q_w = -\Delta W - \Delta Q_k$	Carnot-Prop.: $\frac{\Delta Q_w}{T_w} + \frac{\Delta Q_k}{T_k} = 0$ Clausius: $\oint \frac{\delta Q}{T} = 0$
3. HS Entropie	Entropie: Extensives Maß für Energie, die nicht für Arbeit verfügbar ist; für die Unordnung und die Multiplizität eines Systems.		
	$dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T}$; $\oint \delta S = 0$	$\Delta S = k_B \ln \frac{W_e}{W_a} \geq 0$; $S = k_B \ln \Omega \approx k_B \ln \phi$	Sackur-Tetrode: $S = Nk_B \left(\ln \left(\frac{1}{n \lambda^3} \right) + \frac{5}{2} \right)$; $n = \frac{N}{V}$; $\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$
Fundamentalgl. („FG“)	Enthalpie H	Helmholtz'sche freie Energie F	Freie Enthalpie G („Gibbs'sche freie Energie“)
$E \equiv TS - pV + \mu N$ $dE = \delta Q + \delta W$ $dE = TdS - p dV + \mu dN$	$H \equiv E + pV$ $\xrightarrow{abl.,FG \text{ einsetz.}}$ $dH = T dS + V dp$ $dp=0$: H=Energie, um E um dE zu erhöhen, wenn ein Teil der Energie für p dV verw. wird.	$F \equiv E - TS$ $\xrightarrow{abl.,FG \text{ einsetz.}}$ $dF = -S dT - p dV$ $F = -k_B T \ln(Z_k)$ Thermod. Potential: $dF \leq 0$	$G \equiv H - TS$ $\xrightarrow{abl.,FG \text{ einsetz.}}$ $G \equiv E + pV - TS$ $dG = -S dT + V dp$ Thermod. Potential: $dG \leq 0$
Extensive Variable: V, S, N, M und alle thermodynam. Potentiale E, S, H, F, G	Intensive Variable: sind größenunabhängig z.B. p, T, μ, b	Konjugierte Variable: $V \leftrightarrow p; S \leftrightarrow T; N \leftrightarrow \mu; M \leftrightarrow B$	
Gleichgewichtsbedingung: GLG bei Gleichheit der intensiven Variablen: mechanisch: $p_1 = p_2$, thermisch: $T_1 = T_2$, chemisch: $\mu_1 = \mu_2$.			
• Isoliertes System: Natürliche Variablen E, V, N . Potential: $E(S, V, N)$ oder $S(E, V, N)$ • Geschlossenes System mit Energietausch, ohne Volumenvariation und Teilchentausch: Natürliche Variablen T, V, N . Potential: $F(T, V, N)$ • Geschlossenes System mit Volumenvariation, ohne Teilchentausch: Natürliche Variablen S, p, N . Potential: $H(S, p, N)$ • Geschlossenes System mit Energietausch und Volumenvariation, ohne Teilchentausch: Natürliche Variablen T, p, N . Potential: $G(T, p, N)$ • Offenes System mit Austausch von Energie und Teilchen. Natürliche Variablen T, V, μ . Potential: großkanonisches Potential $J(T, V, \mu)$			
Reversibel: Prozess kann ohne Änderung von System oder Umgebung umgekehrt werden. Reversibel \Rightarrow quasi-statisch.			
Gibbs-Duhem: $-S dT + V dp - N d\mu = 0$... Es gibt kein Potential mit ausschließlich intensiven Variablen (keine Info über Systemgröße)			

Maxwell-Diagramm

	Echt viele Fysiker trinken gerne Pils hinterm Schreibtisch	Annahme: $N=const.$ Ecken: nat. Variable Seitenmitt.: Potentiale	Bsp. Mitte- Ecke- Ecke:	$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = -p$ $\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V,N} = T$	Bsp. Ecke- Ecke senkr.	$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_{T,N} = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,N}$	Bsp. Ecke- Ecke waagr	$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,N} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N}$
--	--	--	-------------------------------	---	------------------------------	--	-----------------------------	---

Response-Funktionen: Zweite Ableitungen thermodynamischer Potentiale bzgl. natürlicher Variablen

spez. Wärme isochor	$C_V \stackrel{def}{=} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N}$	$dE = TdS \Rightarrow C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,N}$	$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} \Rightarrow C_V = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_{V,N}$
spez. Wärme isobar	$C_p \stackrel{def}{=} \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{p,N}$	$dH = TdS \Rightarrow C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{p,N}$	$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,N} \Rightarrow C_p = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_{p,N}$
Thermodynam. Stabilität isoth.	$\kappa_T \stackrel{def}{=} -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,N}$	$V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,N} \Rightarrow \kappa_p = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_{T,N}$	Thermodynam. Stabilität adiab. $\kappa_S \stackrel{def}{=} -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{S,N}$
Ausdehnungs-koeff. isobar	$\alpha_p \stackrel{def}{=} \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,N}$	$V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,N} \Rightarrow \alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial p}\right)_N$	Spannungskoeffizient isochor $\beta_V \stackrel{def}{=} \frac{1}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N}$
			$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \Rightarrow \beta_V = -\frac{1}{p} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V}\right)_N$

Phasenraum mit N Teilchen in D Raumdimensionen

Γ -Raum für \mathbb{R}^{2D} :	$Dim(\Gamma) = 2DN$	Eingeschl. Vol. $\phi(E) = \frac{1}{h^{DN} N!} \int_{H \leq E} d^{DN} q d^{DN} p$	In Box: $\phi(E) = \frac{1}{h^{DN} N!} V_N^N \int_{H \leq E} d^{DN} p$! nur wenn nicht unterscheidbar
Hamilton	$H = T + V$	Teilchen in Box 1D $H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ mit $V(q) = \begin{cases} 0 & q \leq \frac{L}{2} \\ \infty & q > \frac{L}{2} \end{cases}$	Harm. Osz. 1D $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$	μ -Raum \mathbb{R}^n $Dim(\mu) = 2D$
Liouville'sches Theorem	$\frac{dp}{dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \{p, H\} = 0$... keine „Quellen“ u. „Senken“ von Phasenraumpunkten; keine Schnittpunkte von Trajektorien. $\Rightarrow V_0 = V_t$... Erhaltung des Phasenraumvolumens			
Ergodisch	Energie ist einzige Invariante.			
Ergoden-hypothese	Mikrokanonisches Ensemble, ergodisch: Alle Mikrozustände gleicher Energie sind gleich wahrscheinlich. $\Rightarrow \bar{A} = \langle A \rangle$ Zeitmittelwert einer Observable: $\bar{A} = \frac{1}{T} \int_0^T A(q(t), p(t)) dt$; Ensemblemittelwert: $\langle A \rangle = \int_{H \leq E} A(\underline{q}, \underline{p}) \rho(\underline{q}, \underline{p}) d^{DN} \underline{q} d^{DN} \underline{p}$			

Klassisches mikrokanonisches Ensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

E, V, N fix (isoliert)	Zust.sum: $\Omega = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{1}{h^{DN} N!} \int_{E-\Delta E \leq H \leq E} d^{DN} q d^{DN} p = \int \delta(E-H) d^{DN} q d^{DN} p = \frac{\partial}{\partial E} \int \Theta(E-H) d^{DN} q d^{DN} p = \frac{\partial}{\partial E} \phi(E)$		
Phasenraumdichte: (Wahrsch. d. Besetzung von Zust. gleicher Energie)	$\rho_{MK}^E(\underline{p}, \underline{q}) = \frac{\delta(E-H)}{\Omega}$	Entropie: $S = k_B \ln(\Omega) \approx k_B \ln(\Phi)$	Erw. wert: $\langle A \rangle_{MK} = \frac{1}{h^{DN} N!} \int A \rho_{MK}^E d^{DN} q d^{DN} p$

Klassisches kanonisches Ensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

T, V, N fix (Wärmebad)	Zust.sum: $Z_K = \int_0^\infty e^{-\beta E} \Omega(E) dE = \frac{1}{h^{DN} N!} \int e^{-\beta H} d^{DN} q d^{DN} p$ mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$	Ideales Gas: $Z_K = \frac{V^N}{N! \lambda_T^N}$ mit $\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$		
Phasenraumdichte (Wahrsch. d. Besetzung von Zust. gleicher Temp.):	$\rho_K(\underline{p}, \underline{q}) = \frac{1}{Z_K} e^{-\beta H}$	Freie Energ $F = -k_B T \ln(Z_K)$	Entropie: $S = -k_B (\ln(\rho_K)) = -\frac{\partial F}{\partial T}$	Druk $p = k_B T \frac{\partial \ln(Z_K)}{\partial V}$
Wahrscheinlichkeit $w(E) dE$	Var 1: $w(E) = \frac{1}{Z_K} \Omega(E) e^{-\beta E} = \frac{1}{Z_K} \frac{\partial \Phi}{\partial E} e^{-\beta E}$ Var 2: $w(E) = \frac{1}{h^{DN} N!} \int \rho_K(\underline{p}, \underline{q}) \delta(H(\underline{p}, \underline{q}) - E) d^{DN} \underline{q} d^{DN} \underline{p} = \frac{1}{Z_K h^{DN} N!} \int e^{-\beta H} \delta(H(\underline{p}, \underline{q}) - E) d^{DN} \underline{q} d^{DN} \underline{p}$ $w(E) = \frac{1}{Z_K h^{DN} N!} \int e^{-\beta \Sigma(p_i^2/a^2 + q_i^2/b^2)} \delta(\Sigma(\frac{p_i^2}{a^2} + \frac{q_i^2}{b^2}) - E) d^{DN} \underline{q} d^{DN} \underline{p}$ $\left \begin{matrix} p_i = a s_i; dp_i = a ds_i \\ q_i = b t_i; dq_i = b dt_i \end{matrix} \right.$ $w(E) = \frac{a^{DN} b^{DN}}{Z_K h^{DN} N!} \int e^{-\beta \Sigma(s_i^2 + t_i^2)} \delta(\Sigma(s_i^2 + t_i^2) - E) d^{DN} \underline{s} d^{DN} \underline{t}$ $\left \begin{matrix} \Sigma(s_i^2 + t_i^2) = r^2 \\ d^{DN} \underline{s} d^{DN} \underline{t} = dr d^{DN} \underline{O}F \end{matrix} \right.$ $w(E) = \frac{a^{DN} b^{DN}}{Z_K h^{DN} N!} \int_0^\infty e^{-\beta r^2} \delta(r^2 - E) dr d^{DN} \underline{O}F$ $\left \begin{matrix} NST = \text{root}(r^2 - E) = \sqrt{E}; \delta(r^2 - E) = \frac{\delta(r - \sqrt{E})}{2r} \\ \left. \frac{\delta(r - \sqrt{E})}{2r} \right _{r=\sqrt{E}} = \frac{\delta(r - \sqrt{E})}{2\sqrt{E}} \end{matrix} \right.$ $w(E) = \frac{a^{DN} b^{DN}}{2\sqrt{E} Z_K h^{DN} N!} \int_0^\infty e^{-\beta r^2} \delta(r - \sqrt{E}) dr d^{DN} \underline{O}F$ $\left \int d^{DN} \underline{O}F = \frac{\partial V_{2DN}}{\partial r} = \frac{\pi^{2DN/2}}{\Gamma(2DN/2+1)} 2DN \cdot r^{2DN-1} \right.$ $w(E) = \frac{a^{DN} b^{DN}}{2\sqrt{E} Z_K h^{DN} N! \Gamma(2DN/2+1)} 2DN \int_0^\infty e^{-\beta r^2} r^{2DN-1} \delta(r - \sqrt{E}) dr$ $w(E) = \frac{a^{DN} b^{DN}}{2\sqrt{E} Z_K h^{DN} N! \Gamma(2DN/2+1)} 2DN e^{-\beta E} E^{(2DN-1)/2}$			
Mittlere Energie	$\langle E \rangle = \frac{1}{h^{DN} N!} \int H(\underline{p}, \underline{q}) \rho_K d^{DN} \underline{q} d^{DN} \underline{p} = \int_0^\infty E w(E) dE = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z_K)$	Varianz $\delta E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = -\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln(Z_K)$		
Wahrsch. räuml. Aufteig. 1 Teilchen:	$w(\vec{r}) d^3 x = A e^{-\beta V(\vec{r})} d^3 x$ mit $A: \iiint_{-\infty}^\infty w(\vec{r}) d^3 x = 1$	oder: $w(\vec{r}) = \frac{1}{h^{DN} N!} \int \rho_K d^{DN} q d^{DN-3} p$		
Wahrsch. Auslenkung 1 Teilchen:	$w(r) dr = (\iint w(x^2 + y^2 + z^2) r^2 \sin(\vartheta) d\varphi d\vartheta) dr$			
Wahrsch. Impuls 1 Teilchen:	$w(\vec{p}) d^3 p = A e^{-\beta T(\vec{p})} d^3 p$ mit $A: \iiint_{-\infty}^\infty w(\vec{p}) d^3 p = 1$	oder: $w(\vec{p}) = \frac{1}{h^{DN} N!} \int \rho_K d^{DN-3} q d^{DN} p$		
Wahrsch. Geschwindigkeit. 1 Teilchen	$\frac{\partial p_i}{\partial v_i} = \frac{\partial(mv_i)}{\partial v_i} = m \Rightarrow dp_i = m dv_i \Rightarrow d^3 p = m^3 d^3 v \Rightarrow w(\vec{v}) d^3 x = w(mv_x, mv_y, mv_z) m^3 d^3 v$			
Virialsatz:	$\langle x_i \frac{\partial H}{\partial x_j} \rangle = k_B T \delta_{ij}$	Komb. System: $Z_k^{(1+2)} = Z_k^{(1)} Z_k^{(2)}$	* Faktor N! nur wenn Teilchen nicht unterscheidbar	

Klassisches großkanonisches Ensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

T, V, μ fix; off. System	Zust.sum: $Z_{GK} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{h^{DN} N!} \int e^{-\beta(H-\mu N)} d^{DN} q d^{DN} p = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_K = e^{z Z_K(N=1)}$ mit $z = e^{\beta\mu}$ („Fugazität“)
Phasenraumdicht	$\rho_K(p, q) = \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(H-\mu N)}$ Großkanon. Potential: $J = F - \mu N = -pV = -k_B T \ln(Z_{GK})$ w d. N Teilch in V: $w(N) = \frac{z^N Z_K}{Z_{GK}}$
Mittl. Teilchen:	$\langle N \rangle = \frac{1}{Z_{GK}} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{h^{DN} N!} \int N e^{-\beta(H-\mu N)} d^{DN} q d^{DN} p = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = k_B T \frac{\partial}{\partial \mu} \ln(Z_{GK}) = z Z_K(N=1)$ Ideales Gas: $Z_{GK} = e^{zV/\lambda^3}$
Mittl. Energ:	$\langle E \rangle = k_B T \left(T \frac{\partial}{\partial T} \ln(Z_{GK}) + \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \ln(Z_{GK}) \right) = \frac{\partial (J)}{\partial \beta} + \mu \langle N \rangle$ Entrop.: $S = -k_B \langle \ln(\rho_{GK}) \rangle = -\frac{\partial J}{\partial T} = k_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln(Z_{GK}) + k_B \ln(Z_{GK})$

Quantenstatistik

Korrespondenzen	statt $(q_i, p) \Rightarrow \Psi_i\rangle$; statt $\rho(q, p) \Rightarrow$ Dichtematrixoperator $\hat{\rho}$; Observable: statt $\langle A \rangle = \int A \rho d^3 p d^3 q \Rightarrow \langle A \rangle = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho})$
Entropie:	$S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln(\hat{\rho}))$ Energie: $\langle E \rangle = \text{Tr}(\hat{H} \hat{\rho})$ Reiner Zustand: $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$; $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1$ $\sum_i f(\epsilon_i) \approx \int_0^\infty \Omega_1 f(\epsilon) d\epsilon$

Mikrokanonisches Quantenensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

Mikrokanonische Zustandssumme:	$\Omega = \sum \text{mögl. Zust.}$ Zustandsdichte $\hat{\rho}_{MK} = \frac{1}{\Omega} \sum_{E_i=E} i\rangle\langle i $ Entropie: $S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln(\hat{\rho})) = k_B \ln(\Omega)$
Bsp.: N Teilchen in fixen Positionen mit 2 Einstellungen; sei i die Anz. der „up“-Teilchen („magn. Dipole“)	Zust.-sum: $\Omega(E_i) = \binom{N}{i} = \frac{N!}{i!(N-i)!}$ Wahrsch. f. Zustand i: $w(E_i) = \frac{\Omega(E_i)}{2^N}$

Kanonisches Quantenensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

Kanon. Zust.sum	$Z_K = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})$ Hamilton: $\hat{H} = \sum_n n\rangle E_n \langle n $ Zust. Dichte: $\hat{\rho}_K = \frac{\sum_n n\rangle e^{-\beta E_n} \langle n }{\sum_n e^{-\beta E_n}}$
Bsp: N Teilchen in fixen Positionen mit 2 Einstellungen; sei i die Anz. der „up“-Teilchen („magnetische Dipole“)	Zust. summe: $Z_K = \sum_{j=0}^N \Omega(j) e^{-\beta E_j}$ Wahrsch. für Zustand E_i : $w(E_i) = \frac{1}{Z_K} \Omega(E_i) e^{-\beta E_i}$
Harmon. Osz; 2 Teilchen	$Z_K^{\text{Fermi}} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=n_1+1}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (n_1+n_2+1)} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=n_1+1}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (2n_1+2n_2-n_1+1)} = e^{-\beta \hbar \omega} \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-2\beta \hbar \omega n_1} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega k}$ $Z_K^{\text{Bose}} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=n_1}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (n_1+n_2+1)} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=n_1}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega (2n_1+2n_2-n_1+1)} = e^{-\beta \hbar \omega} \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-2\beta \hbar \omega n_1} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar \omega k}$

Großkanonisches Quantenensemble mit N Teilchen in D Raumdimensionen

Großkan. Zust.summe	$Z_{GK} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{-\beta(H-\mu N)} = \text{Tr}(e^{-\beta(H_{\text{Fock}} - \mu N_{\text{Fock}})})$ Zust. Dichte: $\hat{\rho}_{GK} = \frac{1}{Z_{GK}} e^{-\beta(H-\mu N)}$ Hamilton: $\hat{H} = \sum_i \epsilon_i \hat{N}_i$	
Bose-Gas	Besetzung	$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1} = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} - 1}$ $\langle N \rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = \sum_i \langle n_i \rangle = \sum_i \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} - 1} = \int_0^\infty (2s+1) \Omega_1 \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon} - 1} d\epsilon = \int_0^\infty \langle N(\epsilon) \rangle d\epsilon$
	Großkan. Pot.:	$J = k_B T \sum_i \ln(1 - z e^{-\beta \epsilon_i}) = \int_0^\infty (2s+1) \Omega_1 \ln(1 - z e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon = -k_B T (2s+1) \int_0^\infty \Phi_1 \frac{\partial}{\partial \epsilon} \ln(1 - z e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon$
	Energie	$\langle E \rangle = \sum_i \epsilon_i \langle n_i \rangle = \sum_i \frac{\epsilon_i}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} - 1} = \int_0^\infty 30 \Omega_1 \frac{\epsilon}{z^{-1} e^{\beta \epsilon} - 1} d\epsilon$
Fermi-gas	Besetzung	$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1} = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} + 1}$ $\langle N \rangle = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = \sum_i \langle n_i \rangle = \sum_i \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} + 1} = \int_0^\infty (2s+1) \Omega_1 \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon} + 1} d\epsilon = \int_0^\infty \langle N(\epsilon) \rangle d\epsilon$
	Großkan. Pot.:	$J = -k_B T \sum_i \ln(1 + z e^{-\beta \epsilon_i}) = -\int_0^\infty (2s+1) \Omega_1 \ln(1 + z e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon = k_B T (2s+1) \int_0^\infty \Phi_1 \frac{\partial}{\partial \epsilon} \ln(1 + z e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon$
	Energie	$\langle E \rangle = \sum_i \epsilon_i \langle n_i \rangle = \sum_i \frac{\epsilon_i}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} + 1} = \int_0^\infty (2s+1) \Omega_1 \frac{\epsilon}{z^{-1} e^{\beta \epsilon} + 1} d\epsilon$
Einstein-Bose-Kond.:	$z = e^{\beta \mu}$. Normal: $\mu < 0$; $z < 1$. $\mu = k_B T \ln(z) = k_B T \ln\left(\frac{\langle N \rangle}{V} \lambda_T^3\right)$. EBK bei $T < T_C$ oder hohem Druck. $EBK: z \geq 1$; $\mu \geq 0$; $\frac{\langle N \rangle}{V} \lambda_T^3 \geq 1$; $\frac{\lambda_T}{L} \geq 1$. (mit mittl. Weglänge $\langle L \rangle \approx \sqrt[3]{\frac{V}{\langle N \rangle}}$)	

Wichtige Integrale und Funktionen

Wichtige Integrale	$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ $\int f(x) e^{-a f(x)} dx = -\frac{\partial}{\partial a} \int e^{-a f(x)} dx$ partiell Integrieren: $\int f'g = fg - \int f g'$
Integral $\int_{H \leq E} dq dp$ (Bsp. Harmon. Oszillator)	$\int_{H \leq E} d^{DN} q d^{DN} p = \int_{\Sigma \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q_i^2}{2} \right) \leq E} d^{DN} q d^{DN} p = \int_{\Sigma \left(\frac{p_i^2}{2mE} + \frac{m\omega^2 q_i^2}{2E} \right) \leq 1} d^{DN} q d^{DN} p$ $\begin{cases} a^2 = 2mE \\ b^2 = \frac{2E}{m\omega^2} \end{cases} =$
	$\int_{\Sigma \left(\frac{p_i^2}{a^2} + \frac{q_i^2}{b^2} \right) \leq 1} d^{DN} q d^{DN} p$ $\begin{cases} p_i = a s_i; dp_i = a ds_i \\ q_i = b t_i; dq_i = b dt_i \end{cases} = a^{DN} b^{DN} \int_{\Sigma (s_i^2 + t_i^2) \leq 1} d^{DN} q d^{DN} p = a^{DN} b^{DN} V_{DN}(R=1)$
Polylogarithmus	$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1}}{z^{-1} e^x - 1} dx = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^n}$
Stirling-Formel	$\lim_{N \rightarrow \infty} \ln(N!) = N \ln(N) - N$ D-dim. Kugel, Volumen: $V_n = \frac{\pi^{n/2} R^n}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)}$ wenn n gerade $\frac{\pi^{n/2} R^n}{(\frac{n}{2})!}$ n-dim. Kugel, Oberfläche: $O_n = \frac{\partial V_n}{\partial R} = \frac{n \pi^{n/2} R^{n-1}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)}$ wenn n gerade $\frac{n \pi^{n/2} R^{n-1}}{(\frac{n}{2})!}$
Gamma-Funktion: Erweiterung d. Fakultät auf \mathbb{C}	$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$; $\text{Re}(z) > 0$ $z! = \Gamma(z+1)$ $\Gamma(z+1) = z \Gamma(z)$ $\Gamma(z) \Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}$ $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$
Delta-Funktion	$\delta(x) \leftrightarrow \delta[\varphi] = \delta_0[\varphi] = \varphi(0) \leftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \varphi(x) dx = \varphi(0)$ $\delta(x-x_0) \delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0)$
	$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$ $\int_a^b \delta(x) dx = \begin{cases} 1, \text{ für } 0 \in [a, b] \\ 0, \text{ sonst} \end{cases}$ $\delta(x) = \frac{d}{dx} H(x)$ $f(x) \delta(x-x_0) = f(x_0) \delta(x-x_0)$ $\delta(x) = \delta(-x)$
	$x \delta(x) = 0$ $\delta(ax) = \frac{1}{ a } \delta(x)$ $ x \delta(x^2) = \delta(x)$ $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x-NST_i)}{ f'(NST_i) }$; NST_i ...einfache NST $\int \delta(x) dx = \Theta(x)$
Heaviside-Funktion	$\Theta(x) \leftrightarrow \Theta[\varphi] = \int_0^\infty \varphi(x) dx$; $\Theta(x-x_0) = \int_{-\infty}^{x-x_0} \delta(t) dt$; $\Theta(x) = \begin{cases} 1 \text{ für } x > 0 \\ \frac{1}{2} \text{ für } x = 0 \\ 0 \text{ sonst} \end{cases}$ $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$
Exp.funktion	$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$ Geometr. Reihe: $\sum_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1-q}$; $(0 < q < 1)$
$\cosh(z) = \frac{e^z + e^{-z}}{2}$; $\sinh(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{2}$; $\tanh(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$; $\coth(z) = \frac{e^z + e^{-z}}{e^z - e^{-z}}$	

Sonstiges

Vollständig Differential	$df(x,y) = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy$	Sei $dF = \vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r}$. Wenn $\int_{C_1} \vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} = \int_{C_2} \vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r}$, dann ist $\vec{f}(\vec{r}) \cdot d\vec{r}$ vollst. Differential
	Hinreichende Bedingung: $\nabla \times \vec{f}(\vec{r}) = 0$ („wirbelfrei“) im einfach zusammenhängenden Gebiet G. In \mathbb{R}^2 : $\frac{\partial f_y}{\partial x} = \frac{\partial f_x}{\partial y}$	
Exakte, nicht separable DG erster Ordnung	$p(x,y) + q(x,y)y' = 0 \rightarrow p(x,y) dx + q(x,y) dy = 0$ wobei $\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial q}{\partial x}$	Prüfe: $\frac{\partial p}{\partial y} \stackrel{?}{=} \frac{\partial q}{\partial x} \rightarrow$ wenn nein: finde integrierenden Faktor $a(x,y) \rightarrow \phi(x,y) = \int p(x,y) dx + C(y) = \int q(x,y) dy + D(x) \rightarrow$ bestimme $C(y)$ und $D(x)$
Ermittlung integrierender Faktor	$\frac{\partial p}{\partial y} = p'(x) \wedge \frac{\partial q}{\partial x} = q'(y)$, oder $\frac{\partial p}{\partial y} = p'(y) \wedge \frac{\partial q}{\partial x} = q'(x)$ $\frac{\partial p}{\partial y} = p'(x,y) \vee \frac{\partial q}{\partial x} = q'(x,y)$ und p und q sind Polynome.	z.B. x : Löse DG $\frac{\partial}{\partial y} [p(x,y)a(x)] = \frac{\partial}{\partial x} [q(x,y)a(x)]$ nach a mittels Separation der Variablen $\frac{\partial}{\partial y} [p(x,y)x^\alpha y^\beta] = \frac{\partial}{\partial x} [q(x,y)x^\alpha y^\beta] \rightarrow$ auflösen nach α und β mit KV für alle $x^n y^n$
Homogene Fkt.	$f(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^k f(x,y,z) \Rightarrow k f(x,y,z) = \frac{df}{dx} x + \frac{df}{dy} y + \frac{df}{dz} z$	$E(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = \lambda E(S, V, N) \Rightarrow E = \frac{\partial E}{\partial S} S + \frac{\partial E}{\partial V} V + \frac{\partial E}{\partial N} N$
Jacobi-Trafo	$\frac{\partial(s,t)}{\partial(x,y)} = \det \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial s}{\partial y}\right)_x \\ \left(\frac{\partial t}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial t}{\partial y}\right)_x \end{pmatrix} = \left(\frac{\partial s}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial t}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial s}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial t}{\partial y}\right)_x$	$\frac{\partial(s,t)}{\partial(x,y)} = \frac{\partial(t,s)}{\partial(y,x)}$ $\frac{\partial(s,t)}{\partial(x,y)} = -\frac{\partial(s,t)}{\partial(y,x)}$ $\frac{\partial(x,y)}{\partial(s,t)} = \left(\frac{\partial(s,t)}{\partial(x,y)}\right)^{-1}$ $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,g)} = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,y)} \frac{\partial(y,x)}{\partial(x,g)} = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,y)} \frac{\partial(y,x)}{\partial(g,x)} = \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x$
$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g$ umwandeln, Variante (1)	$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x dy \dots (1) \quad g = \text{const.} \Rightarrow dg = 0 \Rightarrow \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y dx + \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x dy = 0 \Rightarrow dy = -\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x^{-1} dx \stackrel{(1)}{\Rightarrow}$ $df = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y dx - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x^{-1} dx \cdot \frac{1}{dx} \Rightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x^{-1}$	
$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g$ Umwandeln, Variante (2) (Jacobi-Trafo)	$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,g)} = \frac{\partial(f,g)}{\partial(x,y)} \frac{\partial(y,x)}{\partial(x,g)} = \det \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \\ \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x \end{pmatrix} \frac{\partial(x,y)}{\partial(x,g)} = \left(\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y\right) \frac{\partial(x,y)}{\partial(x,g)} \frac{\partial(y,x)}{\partial(x,g)} = \frac{\partial(y,x)}{\partial(g,x)} = \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x$ $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_g = \left(\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y\right) \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x^{-1}$	
Kreisrelation	$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_g \left(\frac{\partial y}{\partial g}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y = -1$	Poisson-Klammer: $\{\rho(p,q), H(p,q)\} = \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \sum_i \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i}$
Legendre-Trafo	Trafo $f(x) \rightarrow g(p(x))$ mit $p = \frac{\partial f}{\partial x} \Rightarrow$ Var.1: $g(p) = f(x(p)) - p x(p)$ Var.2: $g(p) = p x(p) - f(x(p))$ Bsp.: $E(S; V, N) \rightarrow F(T; V, N)$ mit $T = \frac{\partial E}{\partial S} \Rightarrow F(T; V, N) = E(S(T; V, N); V, N) - T S(T; V, N)$	
D-dim. Harm. Oszillator	$H = \sum_{i=1}^D \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q_i^2}{2}$	Entartung der Besetzung $\langle n_i \rangle$: $g_i = \binom{D+i-1}{i} = \frac{(D+i-1)!}{i!(D-1)!}$
Binomialverteilung	Wahrscheinlichkeit k von N Teilchen im Volumen V_1 zu finden wenn $p_1 = V_1/V_{ges}$	$w(k p_1, N) = \binom{N}{k} p_1^k (1-p_1)^{N-k}$ Funktion auf Matrixoperator: $f(\hat{A}) = \sum_{i=1}^n f(\lambda_i) \frac{ n_i\rangle\langle n_i }{\langle n_i n_i\rangle}$
Eigenwerte	Löse $\det(\hat{A} - \lambda \mathbb{1}) = 0$	Numerische Vielfachheit („Entartung“) n_i für $\lambda_i = a$: Anzahl EW mit gleichem Wert a .
Eigenvektoren	EV \vec{v}_i zu EW λ_i : $\begin{bmatrix} x - \lambda_i & x & x & x & 0 \\ x & x - \lambda_i & x & x & 0 \\ x & x & x - \lambda_i & x & 0 \\ x & x & x & x - \lambda_i & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{Gauss}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & a & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{matrix} x_1 = -at \\ x_2 = 0 \\ x_3 = s \\ x_4 = t \end{matrix} \Rightarrow \vec{v}_i = s \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	