Aufgabe 11.1 Boltzmann $\boldsymbol{H}$-Funktion im Gleichgewicht

Die Maxwell-Boltzmann Verteilung ist die stationäre Lösung der Boltzmann Transportgleichung in der Abwesenheit eines äusseren Treibers ($\boldsymbol{F} = 0$):

$$f_0 = n \left(\frac{1}{2\pi m k_\mathrm{B} T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}_0)^2}{2 m k_\mathrm{B} T} \right) .$$

Das Ziel dieser Aufgabe ist es, mit der Maxwell-Boltzmann Verteilung vertraut zu werden, die in der kinetischen Gastheorie eine wichtige Rolle spielt. Ausserdem soll der Umgang mit Gauss'schen Integralen geübt werden.

a) **Gauss'sche Integrale** (mathematische Vorbereitung):

   i. Zeige, dass die Lösung des Gauss'schen Integrals gegeben ist durch

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; e^{\frac{-x^2}{2}} = \sqrt{2\pi}.$$

   Tipp: Vergleiche die Integration in zwei Dimensionen in kartesischen Koordinaten mit derjenigen in Polarkoordinaten:

$$\iint_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \; e^{-(x^2+y^2)/c^2} = \int_0^{\infty} \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \; r e^{-r^2/c^2} .$$

   ii. Berechne anschliessend die allgemeine Lösung für Integrale der Form

$$\int_0^{\infty} \mathrm{d}x \; x^{2n} e^{-\alpha x^2} \quad \text{oder} \quad \int_0^{\infty} \mathrm{d}x \; x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} .$$

   Tipp: Man leite nach α ab, bzw. substituiere $y = x^2$.

b) **Resultierende Eigenschaften**:
Verifiziere die im Skript angegebenen mittleren Werte für Impuls, Energie und Geschwindigkeit (setze $\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{0}$ bei $\langle \varepsilon \rangle$ und $\bar{v}$):

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle \stackrel{!}{=} \boldsymbol{p}_0 , \qquad \langle \varepsilon \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \stackrel{!}{=} \frac{3}{2} k_\mathrm{B} T , \qquad \bar{v} = \left\langle \frac{|p|}{m} \right\rangle \stackrel{!}{=} \sqrt{\frac{8 k_\mathrm{B} T}{\pi m}} .$$

c) **Boltzmann $\boldsymbol{H}$-Funktion im Gleichgewicht**:
Die Boltzmann H-Funktion wurde im Skript (Kap. 11.2) definiert als

$$H(t) = \int \mathrm{d}^3 p \; f \ln f .$$

Berechne den Wert dieser Funktion im Gleichgewicht, also $H_0 = \int \mathrm{d}^3 p \; f_0 \ln f_0$.

d) **Entropie aus der Boltzmann H-Funktion**:
Durch Multiplikation mit $-k_\mathrm{B} V$ erhält man aus der H-Funktion die Entropie S. Zeige, dass die auf diesem Weg definierte Entropie $S = -k_\mathrm{B} V H_0$ extensiv ist und vergleiche sie mit der früheren Definition (3.22) aus dem Skript.
Hinweis: Siehe auch Serie 9, Aufgabe 1.

Aufgabe 11.2 Wärme- und Ladungstransport im Elektronengas

In dieser Aufgabe wollen wir die Betrachtung des Wärmetransports im klassischen Gas (vgl. Skript) auf elektrisch geladene Teilchen (z.B. Elektronen) erweitern, wodurch zusätzlich zum thermischen ein Ladungstransport entsteht.

Für fermionische Teilchen ist die Gleichgewichtsverteilung gegeben durch die Fermiverteilung (welche das Pauli Ausschluss-Prinzip berücksichtigt):

$$f_0(\boldsymbol{v}) = \left(e^{[\varepsilon(\boldsymbol{v})-\mu]/k_B T} + 1\right)^{-1},$$

wobei μ das chemische Potential und $\varepsilon(\boldsymbol{v}) = m\boldsymbol{v}^2/2$ die Energie bei Geschwindigkeit $\boldsymbol{v}$ bezeichnen. Wir erhalten die *lokale* Fermiverteilung $f_{\ell 0}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v})$ indem wir in f_0 die Temperatur und das chemische Potential als orts- aber nicht zeitabhängig ansetzen, $T = T(\mathbf{r})$ und $\mu = \mu(\boldsymbol{r})$.

a) **Linearisierte Boltzmann Transportgleichung im Relaxationszeitansatz**

Finde eine Lösung der linearisierten BTG im Relaxationsansatz (d.h. finde g) für die obenstehende lokale Fermiverteilung unter der Annahme, dass das angelegte elektrische Feld $\boldsymbol{E}$ und der Temperaturgradient statisch sind:

$$[\partial_t + \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} + (\boldsymbol{F}/m) \cdot \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{v}}] f_{l0} = -\frac{f - f_{l0}}{\tau} \equiv -\frac{g}{\tau},$$

Tipp: Berechne zunächst die Ableitungen $\partial_\varepsilon f_{\ell 0}$, $\partial_\mu f_{\ell 0}$ und $\partial_T f_{\ell 0}$. Die letzten beiden lassen sich durch $\partial_\varepsilon f_{\ell 0}$ ausdrücken. Fasse damit die verbleibenden Terme von g zusammen.

b) **Wärmestrom und elektrischer Strom**

Formuliere Ausdrücke für die Wärmestromdichte $\boldsymbol{j}_\mathrm{Q}$ und die elektrische Stromdichte $\boldsymbol{j}_\mathrm{E}$ als Integral über die Verteilfunktion f und schreibe diese anschliessend für $f_{\ell 0}$ und g um.

Tipps: Die Teilchenstromdichte lässt sich als Integral über $\boldsymbol{k} = m\boldsymbol{v}/\hbar$ ausdrücken:

$$\boldsymbol{j}_\mathrm{Teilchen}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int \mathrm{d}^3k \; \boldsymbol{v} f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v}) \,.$$

Mithilfe des 1. HS, $\delta Q = \mathrm{d}U - \mu \mathrm{d}N$ lässt sich die Wärmestromdichte schreiben als

$$\boldsymbol{j}_\mathrm{Q}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{j}_\mathrm{Energie}(\boldsymbol{r}) - \mu(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{j}_\mathrm{Teilchen}(\boldsymbol{r}) \,,$$

wobei die Energieflussdichte gegeben ist durch

$$\boldsymbol{j}_\mathrm{Energie}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi^3} \int \mathrm{d}^3k \; \varepsilon(\boldsymbol{v}) \boldsymbol{v} f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{v})$$

Argumentiere, dass die Beiträge von $f_{\ell 0}$ zu den Strömen verschwinden müssen.

c) **Transportmatrix**

Da ein Gradient im elektrischen Potential die gleiche Wirkung hat wie ein Gradient im chemischen Potential, können wir diese zusammenfassen zum (Gradient im) elektrochemischen Potential, $\boldsymbol{\mathcal{E}} = \boldsymbol{E} + \boldsymbol{\nabla}\mu/e$. Damit können wir den Zusammenhang zwischen Gradienten und resultierenden Strömen mithilfe der *Transportmatrix* notieren:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{j}_\mathrm{E} \\ \boldsymbol{j}_\mathrm{Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{L}}_{11} & \hat{\mathbf{L}}_{12} \\ \hat{\mathbf{L}}_{21} & \hat{\mathbf{L}}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mathcal{E}} \\ -(\boldsymbol{\nabla}T)/T \end{pmatrix} .$$

Bestimme die (matrixwertigen) Koeffizienten $\hat{\mathbf{L}}_{kl}$ durch Vergleich mit den Resultaten von b) und zeige explizit, dass $\hat{\mathbf{L}}_{12} = \hat{\mathbf{L}}_{21}$ gilt (Onsager-Casimir Beziehung).

Zeige anschliessend, dass man diese Koeffizienten zusammenfassend schreiben kann als

$$\hat{\mathbf{L}}_{11} = e^2 \hat{\mathbf{I}}^{(0)}\,, \qquad \hat{\mathbf{L}}_{12} = \hat{\mathbf{L}}_{21} = -e\hat{\mathbf{I}}^{(1)}\,, \qquad \hat{\mathbf{L}}_{22} = \hat{\mathbf{I}}^{(2)}\,,$$

mit $\hat{\mathbf{I}}$ Diagonalmatrizen mit Einträgen der Form

$$\hat{\mathbf{I}}_{ij}^{(\alpha)} = \delta_{ij} \int \mathrm{d}\varepsilon \left(-\frac{\partial f_{\ell 0}}{\partial \varepsilon} \right) \sigma(\varepsilon)(\varepsilon - \mu)^\alpha\,,$$

wobei $\sigma(\varepsilon)$ eine noch zu bestimmende Funktion ist. In Festkörpern entspricht die Verteilfunktion nahezu einer Stufenfunktion, folglich gilt für die Ableitung $\partial_\varepsilon f_{\ell 0} \sim \delta(\varepsilon - \mu)$ und wir können den Integranden von $\hat{\mathbf{I}}$ um $\varepsilon = \mu$ entwickeln. Bestimme die Einträge der Transportmatrix zur Ordnung $\mathcal{O}(T^2)$.

d) **Wiedemann-Franz Gesetz**: Zeige, dass das *Wiedemann-Franz Gesetz* für das Verhältnis von thermischer und elektrischer Leitfähigkeit gilt, d.h., dass

$$\frac{\varkappa}{\sigma} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3e^2} T.$$

Hinweis: Die Leitfähigkeiten sind definiert durch $\boldsymbol{j}_\mathrm{E} = \sigma \boldsymbol{\mathcal{E}}$ und $\boldsymbol{j}_\mathrm{Q} = -\varkappa \boldsymbol{\nabla} T|_{\boldsymbol{j}_\mathrm{E}=0}$. Der elektrische Strom muss gleich Null gesetzt werden, weil wir an der thermischen Leitfähigkeit im *stationären* Fall interessiert sind, wo keine Teilchen fliessen.