Theoretische Physik 5: Thermodynamik und Statistische Physik

WiSe 2022 / 2023 – Prof. Marc Wagner

Laurin Pannullo: pannullo@itp.uni-frankfurt.de
Marc Winstel: winstel@itp.uni-frankfurt.de

Aufgabenblatt 7

Abgabe am 09.12.2022. Besprechung in den Tutorien vom 12.12. - 16.12.2022

Aufgabe 1 [*Der Gleichverteilungssatz*] (3+1=4 Pkt.)

Mit dem kanonischen Zugang kann man den Gleichverteilungssatz zeigen, welcher bereits in der Diskussion von Aufgabe 3 auf Blatt 4 erwähnt wurde. Der Gleichverteilungssatz ist ein Satz aus der statistischen Mechanik und besagt für ein System mit Hamiltonfunktion $H = H(q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f)$, dass

$$\overline{z_i \frac{\partial H}{\partial z_i}} = k_B T, \quad z_i \in \{q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f\} \tag{1}$$

wobei $\overline{}$ den Mittelwert im kanonischen Ensemble bezeichnet. Als Spezialfall kann man ableiten, dass jeder Energiebeitrag in H, der quadratisch im Freiheitsgrad z_i ist, dieselbe mittlere Energie $k_B T/2$ zugeordnet bekommt.

(i) Zeige den Gleichverteilungssatz, indem du den kanonischen Ensemblemittelwert aus Gleichung (1) berechnest.
Hinweis: Nimm an, dass die Randbedingung $z_i \exp(-\beta H)\,|_{z_i=\pm\infty} = 0$ gilt. Dies ist für viele physikalisch relevante Systeme, wie den harmonischen Oszillator oder ein Kastenpotential, erfüllt.

(ii) Betrachte eine beispielhafte Hamiltonfunktion $H = p^2/2m + V(x) = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ und berechne die mittlere kinetische sowie die mittlere potentielle Energie des Systems. Was ändert sich, wenn $V(x) = \lambda x^4/4$?

Aufgabe 2 [*Ultrarelativistisches Gas*] (2+1+2+2+1=8 Pkt.)

In dieser Aufgabe betrachten wir ein Beispiel, welches illustriert inwiefern sich der Aufwand einer mikrokanonischen und einer kanonischen Rechnung unterscheiden kann. Wir betrachten N ununterscheidbare Teilchen eines ultrarelativistischen Gases, welches wir klassisch (also nicht quantenmechanisch) behandeln. Die Teilchen sind in diesem Limes masselos und bewegen sich mit Lichtgeschwindigkeit. Die Hamiltonfunktion des Systems ist

$$H = \sum_{i=1}^{N} |\vec{p}_i| c, \tag{2}$$

wobei $\vec{p}_i$ der Impuls des i-ten Teilchens ist und c die Lichtgeschwindigkeit.

Im ersten Teil der Aufgabe versuchen wir den Lösungsweg zur mikrokanonischen Berechnung nachzuvollziehen. Um die mikrokanonische Zustandssumme

$$\Omega(E, V, N) = \frac{\partial \Phi(E, V, N)}{\partial E} \delta E \tag{3}$$

zu berechnen benötigen wir einen Ausdruck für das Phasenraumvolumen

$$\Phi(E,V,N) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}N!}\int_{H\leqslant E} \mathrm{d}^{3N}q\,\mathrm{d}^{3N}p \tag{4}$$

als Funktion der Energie.

(i) Reduziere den Ausdruck für Φ in Gl. (4) auf

$$\Phi(E,V,N) = \phi(E,V,N)\,I_N = \phi(E,V,N) \int\limits_{\substack{\sum_{n=1}^{N} x_n \leqslant 1 \\ x_n \geqslant 0\,\forall\, n}} \prod_{n=1}^{N} \mathrm{d}x_n\, x_n^2, \tag{5}$$

wobei $\phi(E,V,N)$ ein zu bestimmender Vorfaktor ist, in dem kein Integral mehr auftritt.

(ii) Skizziere das Integrationsvolumen in I_N für $N = 2$ und $N = 3$. Argumentiere warum diese Integration herausfordernder als das auftretende Impulsintegral in der mikrokanonischen Zustandssumme des idealen Gases ist.

(iii) Berechne nun die mikrokanonische Zustandssumme und zeige, dass die Entropie

$$S(E,V,N) = Nk_B\left[1+\ln\left(\frac{V}{N}\frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{E}{\hbar c}\right)^3\right)\right] + k_B\ln(I_N) \tag{6}$$

für $\delta E \ll E$ und $N \gg 1$ beträgt. Berechne weiterhin die Temperatur als Funktion der Energie und den Druck als Funktion der Temperatur. Welche Größe kann man nicht ohne genaue Kenntnis des Wertes von I_N berechnen?

Nun wollen wir die mittlere Energie und den Druck über den kanonischen Zugang berechnen.

(v) Berechne die kanonische Zustandssumme

$$Z(\beta,V,N) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}N!}\int \mathrm{d}^{3N}q\,\mathrm{d}^{3N}p\exp\left(-\beta H\right). \tag{7}$$

(vi) Verwende die kanonische Zustandssumme um Druck und mittlere Energie als

$$p = \frac{Nk_BT}{V} \quad \text{und} \quad E = 3Nk_BT \tag{8}$$

zu berechnen. Vergleiche mit deinen Ergebnissen der mikrokanonischen Rechnung.

Aufgabe 3 [*Ensemblemittelwerte als Ableitung der Großkanonischen Zustandssumme*] `(2+2=4 Pkt.)`

In Kapitel 1.14 wurde die Zustandssumme des großkanonischen Ensembles

$$Y(T,V,\mu) = \sum_r \mathrm{e}^{-\beta(E_r - \mu N_r)} \tag{9}$$

als Summe über alle Mikrozustände r eingeführt. Ensemblemittlewerte berechnen sich in gewohnter Weise über die Wahrscheinlichkeitsverteilung P_r der Mikrozustände, d.h. über

$$X = \sum_r P_r X_r = \frac{1}{Y(T,V,\mu)} \sum_r X_r \, \mathrm{e}^{-\beta(E_r - \mu N_r)}, \tag{10}$$

wobei hier P_r aus Kapitel 1.14 eingesetzt wurde.

(i) Zeige dass sich der Ensemblemittlewert der Energie, gegeben durch Gleichung (10), berechnen lässt durch

$$E(T,V,\mu) = -\frac{\partial \ln Y(T,V,\mu)}{\partial \beta} + \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial \ln Y(T,V,\mu)}{\partial \mu}. \tag{11}$$

(ii) Zeige nun, dass sich die Ensemblemittelwerte $P(T,V,\mu)$ und $N(T,V,\mu)$ berechnen lassen durch

$$P = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Y(T,V,\mu)}{\partial V}, \tag{12}$$

$$N = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Y(T,V,\mu)}{\partial \mu}. \tag{13}$$

Wie würde sich eine allgemeine verallgemeinerte Kraft $X_j \neq \mu$ (da μ im großkanonischen Ensemble durch das äußere Teilchenbad vorgegeben ist) zugehörig zu dem äußeren Parameter x_j berechnen lassen?

Aufgabe 4 [*Das ideale Gas im großkanonische Ensemble*] `(2+2=4 Pkt.)`

Wir betrachten ein ideales Gas bestehend aus klassischen, nichtrelativistischen Punktteilchen im Volumen V bei Temperatur T und chemischem Potential μ im großkanonischen Ensemble.

(i) Berechne die großkanonische Zustandssumme $Y(T,V,\mu)$ für dieses System.

(ii) Berechne mithilfe der großkanonischen Zustandsumme $N(T,\mu)$, $E(T,\mu)$, $P(T,\mu)$. Stelle dein Ergebnis für N nach μ um und vergleiche den Ausdruck mit dem Ergebnis für $\mu(T,V,N)$ aus einer kanonischen Rechnung.