Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Christoph Berke

Statistische Physik

Blatt 2

Wintersemester 2023/24

Abgabe: Montag, **23.10.2023**, 10:00 Uhr **Besprechung**: Montag (!), 23.10.2023
Webseite: https://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2023-StatPhys.shtml

Aufgabe 7: Simulation eines zweidimensionalen Gases (keine Abgabe)

Im Laufe der Vorlesung werden wir zur Veranschaulichung wichtiger Konzepte immer wieder auf das zweidimensionale Gas zurückkommen. Ein Grundgerüst zur Simulation dieses Systems finden sie in dem auf der Homepage bereit gestellten Notebook. Dieses Grundgerüst werden Sie in den Übungen der kommenden Woche noch erweitern. Laden Sie das Notebook herunter und stellen Sie zunächst sicher, dass die benötigten Pakete installiert sind und die Simulation auf Ihrem Computer läuft. Vollziehen Sie dann Bedeutung und Implementierung der gegebenen Funktionen nach und testen Sie unterschiedliche Anfangsbedingungen.

Aufgabe 8: Volumina hochdimensionaler Kugeln (10 Punkte + 2 Bonuspunkte)

Systeme in der statistischen Physik haben in der Regel sehr viele Freiheitsgrade. Bei der Abzählung von Mikrozuständen müssen deshalb häufig *hochdimensionale Volumina* berechnet werden, etwa bei der Behandlung des idealen Gases (Skript, S. 19). Wir wollen hier das in der Vorlesung verwendete Resultat $V_{3N}(R) = \frac{\pi^{3N/2}}{(3N/2)!} R^{3N}$ für das Volumen einer $3N$-dimensionalen Kugel herleiten.

a) Das Volumen einer n-dimensionalen Kugel mit Radius R ist durch

$$V_n(R) = \int\limits_{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \leq R^2} dx_1 dx_2 \dots dx_n \tag{1}$$

gegeben. Verwenden Sie n-dimensionale Kugelkoordinaten um zu zeigen, dass das Volumen die Form $V_n(R) = \frac{K_n}{n} R^n$ annimmt. *Hinweis:* n-dimensionale Kugelkoordinaten bestehen aus dem Radius r, sowie $n-1$ Winkeln ϕ_i. Die Funktionaldeterminante hat die Form $\det J_n = r^{n-1} G(\phi_1, \dots, \phi_{n-1})$. Die Konstante K_n kann in Integralform angegeben werden.

Jetzt soll die Konstante K_n bestimmt werden. Dazu berechnen wir das Integral

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\sum_{i=1}^{n} x_i^2} dx_1 \dots dx_n \tag{2}$$

auf zwei verschiedene Arten.

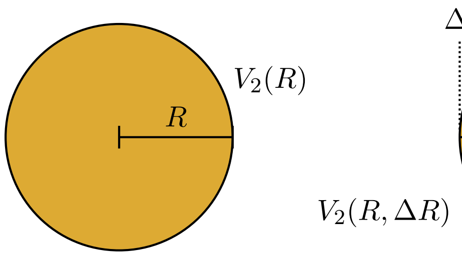

Abbildung 1 – Offenbar ist das Volumen der $n = 2$-dimensionalen Kugel (links) größer als das der rechts gezeigten Kugelschale. In d) sollen Sie zeigen, dass dieser Unterschied für $n \to \infty$ irrelevant wird.

b) Berechnen Sie das Integral I_n durch Faktorisierung der Exponentialfunktion. Der Wert des eindimensionalen Gaussschen Integrals darf ohne Herleitung verwendet werden.

c) Transformieren Sie das Integral I_n jetzt in n-dimensionale Kugelkoordinaten. Identifizieren Sie die Γ-Funktion

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt, \tag{3}$$

und benutzen Sie ihr Ergebnis aus c) um K_n zu bestimmen. Verwenden Sie die Eigenschaft $\Gamma(x+1) = x\,\Gamma(x)$ um zu zeigen, dass das Volumen durch

$$V_n(R) = \frac{(\sqrt{\pi})^n}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} R^n. \tag{4}$$

gegeben ist. Überzeugen Sie sich davon, dass Sie für $n = 3N$ das Resultat aus der Vorlesung erhalten. *Hinweis:* Für $n \in \mathbb{N}$ gilt $\Gamma(n) = (n-1)!$.

d) Zeigen Sie, dass die in Abbildung 1 für $n = 2$ skizzierten Kugeln und Kugelschalen für große n nahezu *gleich groß* sind. Betrachten Sie dafür das Verhältnis $\Delta V_n = \frac{V_n(R,\Delta R)}{V_n(R)}$ der Volumina von Schale und Kugel. Berechnen Sie ΔV_n explizit für $\Delta R = 0.01 \cdot R$ und $n = 3,\ 500,\ 2000$. Was bedeutet das Ergebnis für die Berechnung der Entropie $S(E)$?

e) **Zusatzaufgabe:** Für gerade n vereinfacht sich Gl. (4) zu

$$V_n(R) = \frac{(\sqrt{\pi})^n}{(\frac{n}{2})!} R^n. \tag{5}$$

Leiten Sie eine Rekursionsformel für die Volumina der Einheitssphären $V_n(1)$ her. Das Ergebnis gilt auch für ungerade n. Für $n = 1,\ 2,\ 3$ nimmt das Volumen offenbar mit der Dimension zu $(2 < \pi < \frac{4}{3}\pi)$. Gilt das allgemein für alle n? Stellen Sie die Funktion aus Gl. (4) als Funktion der Dimension n dar, um Ihr Ergebnis zu überprüfen.

Aufgabe 9: Klassische harmonische Oszillatoren (5 Punkte)

In dieser Aufgabe wollen wir unser Wissen über hochdimensionale Volumina nutzen, um die Entropie eines Systems aus N unterscheidbaren, eindimensionalen harmonischen Ozsillatoren mit der klassischen Hamilton-Funktion

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 \right] \tag{6}$$

zu berechnen.

a) Berechnen Sie $S(E) = k_B \ln\left(\frac{\Gamma(E)}{(2\pi\hbar)^N}\right)$. Benutzen Sie die Transformation $x_i = m\omega q_i$ um $\Gamma(E)$ als $2N$-dimensionales Kugelvolumen auszudrücken. Verwenden Sie dann Gl. (5). *Bemerkung:* $\Gamma(E)$ ist das Phasenraumvolumen der Zustände mit $H < E$. Das Wirkungsquantum sorgt dafür, dass das Argument des Logarithmus dimensionslos ist, wie im Skript auf Seite 21 diskutiert.

b) Geben Sie für dieses System die *kalorische Zustandsgleichung*, also den Zusammenhang zwischen Energie und Temperatur an.

Aufgabe 10: Elementare Phasenraumzelle (5 Punkte)

In der Vorlesung (Skript, S. 21/22) wurde der Faktor $\frac{1}{2\pi\hbar}$, der das dimensionsbehaftete Phasenraumvolumen in die Anzahl der Mikrozustände überführt, mit der Unschärferelation $\Delta p \Delta q \sim h$ motiviert. Diese fundamentale Einheit $2\pi\hbar$ der Phasenraumvolumina wollen wir hier erneut begründen, diesmal durch Vergleich des klassischen und des quantenmechanischen Oszillators.

a) Betrachtet werde zunächst die klassische Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \,. \tag{7}$$

Welche Form hat die Kurve konstanter Energie $H(q,p) = E$ im Phasenraum? Wie gross ist das von dieser Kurve eingeschlossene Phasenraumvolumen $\Gamma(E)$?

b) Bestimmen Sie die Zahl der Zustände $\Omega_{\mathrm{qm}}(E)$ mit Energie kleiner als E für den quantenmechanischen Oszillator. Vergleichen Sie ihr Ergebnis mit a) und bestimmen Sie die Größe der elementaren Phasenraumzelle. *Hinweis:* Nehmen Sie zur Bestimmung von $\Omega_{\mathrm{qm}}(E)$ an, dass die Besetzungszahl n des Oszillators sehr groß ist.