Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Carsten Bauer

Statistische Physik

Blatt 11

WS 2017/18

Abgabe: Freitag, **19. Januar** 2018, 10 Uhr

Webseite: http://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2017-StatPhys.shtml

Aufgabe 34: Van-der-Waals Gas (5 Punkte)

Wie in der Vorlesung besprochen, wollen wir zur Modellierung eines realen Gases den Effekt (kurzreichweitiger) Wechselwirkungen untersuchen. Dazu modellieren wir ein Gas durch die van-der-Waals Gleichung

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = k_B T, \tag{1}$$

wobei $v = V/N$ und a und b positive Konstanten sind (siehe Vorlesung für deren Interpretation).

a) Zeigen Sie

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_E = \frac{1}{C_V}\left(p - T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\right). \tag{2}$$

C_V ist die spezifische Wärme.

b) Beweisen Sie, dass sich ein van-der-Waals Gas bei freier Expansion immer abkühlt. Erklären Sie diesen Sachverhalt qualitativ und ziehen Sie einen Vergleich zum idealen Gas.

c) Drücken Sie $\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T$ als Funktion von a, b und V aus. Geben Sie eine physikalische Begründung Ihres Ergebnisses.

d) Beweisen Sie, dass die spezifische Wärme pro Mol $c_V = \frac{N_A}{N} C_V$ ausschließlich von der Temperatur T abhängt, d.h. $c_V = c_V(T)$.
Hinweis: N_A ist die Avogadro Konstante.

e) Berechnen Sie die innere Energie $E(N, T, V)$ als Funktion von c_V, N, T, V, a und b. Nehmen Sie an, dass c_V eine Konstante (d.h. temperaturunabhängig) ist. Ziehen Sie einen Vergleich zum idealen Gas.

f) Berechnen Sie die Entropie $S(N, T, V)$ als Funktion von c_V, N, T, V, a und b. Nehmen Sie auch hier an, dass c_V eine Konstante (d.h. temperaturunabhängig) ist. Ziehen Sie wieder einen Vergleich zum idealen Gas.

Aufgabe 35: Simulation des Lennard-Jones Gases (5 Punkte)

Im Model des Lennard-Jones Gas bewegen sich Teilchen in einer Box und interagieren über eine Wechselwirkung der Form

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right] . \tag{3}$$

Für sehr kleine Distanzen stoßen die Teilchen sich ab, während bei größeren Abständen zunächst eine anziehende Wechselwirkung existiert, die dann aber für sehr weit voneinander entfernte Teilchen gegen Null geht. Der Wert ϵ definiert die Stärke der Wechselwirkung, während σ vom Durchmesser der Teilchen abgeleitet ist.

N derartige Teilchen seien nun in einem zweidimensionalen Kasten der Kantenlänge L eingeschlossen. Die Wahrscheinlichkeit, eine bestimmte Konfiguration der Teilchen zu realisieren ist durch die Boltzmannverteilung gegeben. Aufgrund der großen Anzahl erlaubter Teilchenkonfigurationen wollen wir das Problem mit einer Monte Carlo Simulation angehen.

Der grobe Ablauf der Simulation ist wie folgt: Die Gasteilchen befinden sich in einer Box mit periodischen Randbedingungen und sind zunächst auf einem regelmäßigen Gitter angeordnet. Dann wird ein zufälliges Teilchen ausgewählt und vorgeschlagen, es in eine zufällige Richtung mit Maximalamplitude Δ pro Raumrichtung zu verschieben. Nach Berechnung des Energieunterschieds ΔE, der mit der Verschiebung eines Teilchens einhergeht, wird mithilfe des Metropoliskriteriums

$$\min\left(1, \exp\left(-\beta \Delta E\right)\right) \tag{4}$$

entschieden, ob die neuen Koordinaten übernommen werden oder nicht.

Wir haben eine Implementierung vorbereitet, siehe dieses Julia Notebook, in welchem einige weitere Systemparameter bereits voreingestellt sind.

a) Die Simulation findet mit periodischen Randbedingungen statt, welche in der Funktion `r2(a, b)` implementiert sind. Machen Sie sich klar, wie dies funktioniert.

b) Implementieren Sie den Update-Schritt, d.h. schlagen Sie eine Verschiebung in eine zufällige Richtung um die Maximallänge Δ vor. Berechnen Sie dann die Energiedifferenz zwischen alter und vorgeschlagener Konfiguration. Beachten Sie, dass Sie nur für das zu verschiebende Teilchen die Energien berechnen müssen.

c) Vervollständigen Sie die Funktion `total_energy`, mit der die Energie einer Konfiguration berechnet wird.

d) Für den Temperaturbereich zwischen $T = 0.1$ und $T = 1.5$ ist bereits ein Array aus Temperaturwerten `Ts` voreingestellt. Komplettieren Sie die Schleife, so dass nach jedem Update die Energie, sowie das Quadrat der Energie gemessen und abgespeichert wird. Am Ende sollen Sie aus diesen Daten die spezifische Wärme

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2} \tag{5}$$

als Funktion der Temperatur berechnen und grafisch darstellen.