Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Carsten Bauer

Statistische Physik

Blatt 3

WS 2017/18

Abgabe: Freitag, **10. November** 2017, 10 Uhr, d.h. **14 Tage** Bearbeitungszeit
Webseite: http://www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2017-StatPhys.shtml

Aufgabe 9: Ideales Gas mit internen Freiheitsgraden (6 Punkte)

Wir betrachten ein ideales Gas, wobei jedes Molekül zusätzlich einen Vibrationsfreiheitsgrad besitzt, der durch ein harmonisches Oszillatorpotential beschrieben wird. Da die Moleküle untereinander nicht wechselwirken (bis auf sehr schwache Wechselwirkungen, die das Einstellen eines thermischen Gleichgewichts erlauben), können die harmonischen Oszillatoren als entkoppelt betrachtet werden. Folglich ist die Gesamtenergie des Systems die Summe aus den kinetischen Energien und den oszillatorischen Energien der Moleküle:

$$E = E^{\text{kin}} + E^{\text{osz}} = \sum_{i=1}^{N} (E_i^{\text{kin}} + E_i^{\text{osz}}). \tag{1}$$

Die Entropie des Ensembles entkoppelter harmonischer Oszillatoren im Grenzfall höher Anregungszahlen ist dabei durch

$$S^{\text{osz}} = k_B N \left[\ln \left(\frac{E^{\text{osz}}}{\hbar \omega N} \right) + 1 \right] \tag{2}$$

gegeben.

a) Drücken Sie die Gesamtentropie des Systems als Funktion von E^{kin} und E^{osz} aus.

Durch Streuprozesse kann kinetische Energie auf die Vibrationsfreiheitsgrade (und umgekehrt) übertragen werden, sodass nur die Gesamtenergie E erhalten ist. Durch diesen Austausch stellt sich ein thermisches Gleichgewicht zwischen den Freiheitsgraden ein.

b) Drücken Sie die Gesamtentropie des Systems als Funktion von E^{kin} aus und maximieren Sie S, um den Zusammenhang zwischen E^{kin} und E^{osz} zu finden.

c) Verwenden Sie das Ergebnis aus b) um die Entropie als eine Funktion, die ausschließlich von der Gesamtenergie E abhängt, zu schreiben. Leiten Sie daraus die Beziehung zwischen Gesamtenergie und Temperatur ab. Vergleichen Sie dieses Resultat mit der Beziehung zwischen Energie und Temperatur eines idealen Gases ohne interne Freiheitsgrade aus der Vorlesung.

d) Wir verallgemeinern nun auf die Situation, in der jedes Teilchen des idealen Gases M Vibrationsfreiheitsgrade besitzt, die alle untereinander und mit den kinetischen Freiheitsgraden im thermischen Gleichgewicht stehen. Das bedeutet, dass nur die Gesamtenergie $E = E^{\text{kin}} + \sum_{m=1}^{M} E_m^{\text{osz}}$ konstant ist. Leiten Sie auch für diesen Fall die Beziehung zwischen E und der Temperatur T her.

Aufgabe 10: Druck-Gleichgewicht (5 Punkte)

Es seien zwei ideale Gase mit Teilchenzahl N_1 und N_2 und Volumina V_1 und V_2 gegeben. Diese sind zunächst durch einen wärmedurchlässigen, befestigten Kolben getrennt, sodass sich ein thermisches Gleichgewicht einstellt.

a) Da der Kolben wärmedurchlässig ist, ist nur die Gesamtenergie $E = E_1 + E_2$ konstant. Berechnen Sie die Gesamtentropie des Systems als Funktion von E_1 und maximieren Sie das Ergebnis.

b) Leiten Sie vom Ergebnis aus Aufgabe a) die Relation $T_1 = T_2$ für allgemeine V_1 und V_2 her.
Hinweis: Verwenden Sie die kanonische Zustandsgleichung aus der Vorlesung bzw. aus Aufgabe 9 für $M = 0$.

Nun wird der Kolben gelöst, sodass sich ein neues thermisches Gleichgewicht mit potentiell neuen Temperaturen T_1' und T_2', neuen Drücken p_1', p_2', sowie Volumina V_1' und V_2' einstellt. Bei diesem Prozess bleiben die Gesamtenergie $E = E_1 + E_2$ und das Gesamtvolumen $V = V_1 + V_2$ erhalten.

c) Berechnen Sie die Temperaturen T_1' und T_2' nach Lösung des Kolbens aus der Gesamtenergieerhaltung. Verwenden Sie dazu das Ergebnis aus b).

d) Berechnen Sie die Gesamtentropie des Systems als Funktion von V_1' und maximieren Sie das Ergebnis (es ist $V = V_1' + V_2'$ fest). Zeigen Sie, dass sich im Gleichgewicht die Drücke $p_1' = p_2'$ angeglichen haben.

e) Beweisen Sie, dass die Entropie im Laufe dieses Prozesses zunimmt.
Hinweis: Zeigen Sie, dass das Gleichgewicht einem Maximum und nicht etwa einem Minimum der Entropie entspricht.

Aufgabe 11: Satz von Liouville (5 Punkte)

Es sei ein klassisches System mit generalisierten Koordinaten $p_1, \dots, p_n$ und $q_1, \dots, q_n$ gegeben, welche die üblichen hamiltonischen Bewegungsgleichungen erfüllen. Die klassische Phasenraumdichte ist dann eine Funktion dieser Koordinaten:

$$\rho(\{p_k(t)\}, \{q_k(t)\}, t). \tag{3}$$

Der Satz von Liouville besagt, dass im Gleichgewichtszustand die Phasenraumdichte zeitlich konstant ist:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(\{p_k(t)\}, \{q_k(t)\}, t) = 0. \tag{4}$$

Im Folgenden wollen wir diese Aussage beweisen und numerisch veranschaulichen.

a) Beweisen Sie den Satz von Liouville, indem Sie von der Kontinuitätsgleichung der Phasenraumdichte

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \sum_{k=1}^{n}\left[\frac{\partial}{\partial q_k}(\rho\dot{q}_k) + \frac{\partial}{\partial p_k}(\rho\dot{p}_k)\right] = 0 \tag{5}$$

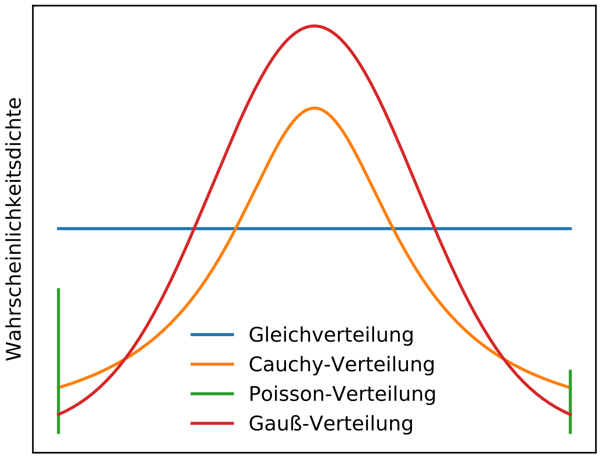
ausgehen.

b) In einem Julia Notebook haben wir für Sie ein Skelett vorbereitet, mit dem Sie die Phasenraumdynamik von verschiedenen physikalischen Systemen untersuchen können. Vorgegeben ist als Beispiel das klassische Pendel. Die Lösung der Differentialgleichungen wird im Notebook durch ein Julia-Paket übernommen und visualisiert.
Erweitern Sie zunächst den Code an der markierten Stelle um die Hamiltongleichungen eines gedämpften Pendels.
Ein weiteres zu studierendes System ist beschrieben durch den Hamiltonian

$$H = \sin(x) + \sin(p). \tag{6}$$

Berechnen Sie ebenfalls für dieses Modell die hamiltonschen Bewegungsgleichungen und fügen Sie diese an der dafür vorgesehenen Stelle ein.
Ihre Aufgabe ist es nun zu studieren, wie sich ein Ensemble von Teilchen, deren Anfangsbedingungen (x_0, p_0) in einem Kreis mit Radius $r = 5$ im Phasenraum gleichmäßig verteilt sind, verhält. Dazu erweitern Sie den Animationsteil an der gekennzeichneten um die entsprechenden Anfangsbedingungen. Beschreiben Sie ihre Beobachtungen für die drei Systeme in Hinblick auf die Erfüllung des Satzes von Liouville.

Aufgabe 12: Zentraler Grenzwertsatz (4 Punkte)



Wir untersuchen in dieser Aufgabe den zentralen Grenzwertsatz mithilfe eines Julia Notebooks (Julia-Version 0.5 und 0.6). In diesem Notebook zeigen wir zunächst, wie Sie Zufallszahlen gemäß einer gewünschten Verteilung erzeugen können. Am Beispiel der Gaußverteilung zeigen wir Ihnen dann, wie Sie aus der Sequenz der Zufallszahlen ein Histogramm erzeugen und dieses anschließend fitten können. Wir wollen nun mehrere Sequenzen von Zufallszahlen erzeugen und das Ergebnis eines Schätzers, wie Mittelwert, Median oder Varianz, jeder Sequenz speichern. Die Verteilung der Ergebnisse dieser Schätzfunktion soll dann als Histogramm dargestellt und mit einer Gaußverteilung gefittet werden, um den zentralen Grenzwertsatz zu überprüfen. Gehen Sie wie folgt vor.

a) Studieren Sie den bereitgestellten Code. Fügen Sie an der markierten Stelle eine Schleife ein, die die Länge einer Sequenz von Zufallszahlen nacheinander auf die Werte $[2, 3, 4, 8, 16, 32, 64]$ setzt. Für jede Länge nehmen Sie 100.000 “Messungen” mit einer gewählten Schätzfunktion Ihrer Wahl auf und erstellen ein Histogramm aus diesen Werten. Stellen Sie die Ergebnisse aller Sequenzlängen in einem Plot dar. Untersuchen Sie so die Gleichverteilung, die Poissonverteilung sowie die Cauchyverteilung auf die Gültigkeit des zentralen Grenzwertsatzes. (Natürlich dürfen Sie gerne darüber hinaus auch andere Verteilungen, wie bspw. die Binomialverteilung studieren!)