Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Carsten Bauer

Statistische Physik

Blatt 4

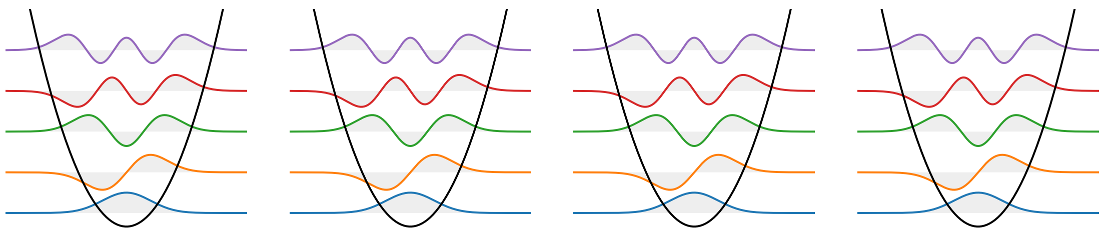
WS 2017/18

Abgabe: Freitag, **17. November** 2017, 10 Uhr

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

Aufgabe 13: Mikrokanonisches und kanonisches Ensemble (6 Punkte)

In dieser Aufgabe vergleichen wir die Resultate der mikrokanonischen und der kanonischen Beschreibung eines makroskopischen Systems von N nicht-wechselwirkenden quantenmechanischen Oszillatoren.



Zunächst betrachten wir das System im *mikrokanonisches Ensemble*:

a) Was sind die möglichen Energiewerte des Systems?
Hinweis: Gehen Sie von der Energie eines einzelnen quantenmechanischen Oszillators mit Besetzungszahl n_i aus. Identifizieren Sie in Ihrem Ergebnis $M = \sum_i n_i$.

b) Zeigen Sie, dass es

$$\Omega(E_M) = \binom{M+N-1}{N-1} \tag{1}$$

mögliche Zustände für eine gegebene Gesamtenergie E_M gibt.

c) Berechnen Sie die Entropie $S = k_B \ln \Omega(E_M)$ des Systems für große N und große M, d.h. verwenden Sie die Stirling-Formel (in der Form $\ln k! = k \ln k - k$). Bringen Sie das Ergebnis in die Form $S = k_B N f(\tilde{m})$, wobei $\tilde{m} = M/N$.

d) Berechnen Sie die zu einer Energie E zugehörige Temperatur $T(E)$.

e) **Zusatzaufgabe:** Überzeugen Sie sich davon, dass das die berechnete Entropie im Limes $\tilde{m} \to \infty$ mit Gleichung (2) auf Blatt 3 übereinstimmt.

Wir betrachten nun das gleiche System im *kanonischen Ensemble*:

f) Berechnen Sie die Zustandssumme

$$Z = \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_N=0}^{\infty} e^{-\beta E(\{n_i\})} \tag{2}$$

für ein festes $\beta = 1/k_B T$.
Hinweis: Verwenden Sie $E(\{n_i\}) \equiv \sum_i E_i(n_i) = \hbar\omega \sum_i (\frac{1}{2} + n_i)$.

g) Beweisen Sie die folgende Identität:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta}. \tag{3}$$

Verwenden Sie diese um $\langle E(T) \rangle$ zu berechnen und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Zusammenhang zwischen Energie und Temperatur aus der mikrokanonischen Berechnung in d).

h) Wir wollen nun die relativen Energiefluktuationen $\Delta E/E$ berechnen. Leiten Sie eine zu Gleichung (3) ähnliche Identität her um $\langle E^2 \rangle$ einfach auswerten zu können. Berechnen Sie daraus $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ und beweisen Sie, dass $\lim_{N\to\infty} \Delta E/E = 0$. Interpretieren Sie das Ergebnis mit Blick auf einen Vergleich der mikrokanonischen und kanonischen Beschreibung des Systems.

Aufgabe 14: Simulation eines idealen Gases (4 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie die Zustandsgleichung des idealen Gases kennengelernt und erfahren, dass die Geschwindigkeiten einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung folgen. Diese Beziehung soll in dieser Aufgabe anhand eines einfachen Modells numerisch untersucht werden. Ein großer Teil des Codes ist bereits in einem Julia Notebook vorbereitet. Eine beliebige Zahl Scheiben endlicher Größe ist in einer Box eingeschlossen. An den Wänden prallen sie ohne Energieverlust ab, untereinander wechselwirken sie in dieser Version noch nicht. Dementsprechend bleibt die ursprüngliche Geschwindigkeitsverteilung konstant, da es keinerlei Austausch von Impulsen gibt. Dies ändert sich, sobald die Scheiben nicht mehr überlappen können, sondern voneinander abprallen.

a) Erinnern Sie sich an die Gleichungen für den elastischen Stoß in einer Dimension. Zwei Teilchen mit Geschwindigkeit v_1 bzw. v_2 und Massen m_1 bzw. m_2 bewegen sich aufeinander zu und kollidieren. Leiten Sie unter Benutzung der Impuls- und Energieerhaltung die Formeln für die Geschwindigkeiten v_1' und v_2' nach dem Stoß her.

b) Die Kollision zweier Scheiben ist ein zweidimensionales Problem. Allerdings ist für den Impulaustausch nur die Achse relevant, die die Scheibenzentren miteinander verbindet. Nehmen Sie zur Vereinfachung an, dass die Masse der Scheiben gleich ist. Projizieren Sie den Impuls der beiden Scheiben auf die Verbindungsachse und verwenden Sie das Ergebnis des vorherigen Aufgabenteils, um die resultierenden Geschwindigkeiten entlang der Achse zu berechnen. Die zur Verbindung senkrechte Komponente bleibt bei der Kollision unverändert. Um diese zu berechnen, benötigen sie den Einheitsvektor senkrecht zur Verbindungsachse. Dieser lässt sich leicht aus dem Einheitsvektor entlang der Verbindungsachse berechnen, indem man beachtet, dass in zwei Dimesionen für einen gegebenen Vektor $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$ gilt, dass $\mathbf{a}' = (a_2, -a_1)$ senkrecht dazu steht. Durch Rückprojektion auf die ursprünglichen Einheitsvektoren $\mathbf{e}_1$ und $\mathbf{e}_2$ lassen sich so die neuen Geschwindigkeitsvektoren berechnen.

c) Im Code finden Sie die Funktion `overlap`. In dieser findet sich bereits eine Schleife über alle Scheibenpaare sowie eine Abfrage, ob sich zwei Teilchen überlappen. Implementieren Sie nun drei Dinge:

(i) Bevor die Berechnung der neuen Geschwindigkeiten erfolgt, sollen die zwei Scheiben wieder so weit voneinader entfernt werden, dass es keinen Überlapp mehr gibt. Dazu benötigen Sie den Einheitsvektor entlang der Verbindungsachse, sowie den Überlapp.

(ii) Berechnen Sie die neuen Geschwindigkeiten nach der Kollision mithilfe der oben hergeleiteten Formeln.

(iii) Beide an der Kollision beteiligten Scheiben werden nun noch einen weiteren Zeitschritt bewegt.