Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Prof. Dr. S. Trebst
Christoph Berke

Statistische Physik

Blatt 2

WS 2020/21

Abgabe: Montag, **16.11.2020**, 10:00 Uhr **Besprechung**: Dienstag, 17.11.2020
Webseite: www.thp.uni-koeln.de/trebst/Lectures/2020-StatPhys.shtml

Aufgabe 7: Simulation eines zweidimensionalen Gases (7 Punkte)

Im Laufe der Vorlesung werden wir immer wieder das Beispiel des zweidimensionalen Gases benutzen, um wichtige Konzepte zu veranschaulichen. Ein Grundgerüst zur Simulation dieses Systems finden sie in dem **Notebook** auf der Homepage. Laden Sie das Notebook herunter und vollziehen Sie die Implementierung der gegebenen Funktionen nach. Folgen Sie anschließend der ausführlichen Aufgabenstellung auf dem Notebook und bearbeiten Sie die Teile a) und b).

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

Systeme in der statistischen Physik haben in der Regel sehr viele Freiheitsgrade. Beim Versuch, Mikrozustände abzuzählen, muss man deshalb häufig **hochdimensionale Volumina** berechnen, etwa – wie in der Vorlesung gezeigt – bei der Berechnung der Entropie des idealen Gases. 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

$$V_n(R) = \int\limits_{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \leq R^2} \mathrm{d}x_1\, \mathrm{d}x_2 \ldots \mathrm{d}x_n \tag{1}$$

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: Die Funktionaldeterminante n-dimensionaler Kugelkoordinaten hat die Form* $\det J_n = r^{n-1} G\left(\phi_1, \ldots, \phi_{n-1}\right)$*. Die Konstante K_n kann in Integralform angegeben werden.*

Jetzt wollen wir die Konstante K_n explizit bestimmen. Dazu berechnen wir das Integral

$$I_n = \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\sum_{i=1}^{n} x_i^2}\, \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_n \tag{2}$$

auf zwei verschiedene Arten.

b) Berechnen Sie das Integral I_n durch Faktorisierung der Exponentialfunktion. *Hinweis: 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

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

und benutzen Sie ihr Ergebnis aus b) 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. Zeigen Sie, dass sich für $n = 3N$ das Resultat aus der Vorlesung ergibt.

d) Zeigen Sie, dass die in Abb. 1 für $n = 2$ skizzierten Kugeln und Kugelschalen für große n das gleiche Volumen haben. Betrachten Sie dafür das Verhältnis $\Delta V_n = V_n(R, \Delta R)/V_n(R)$ und berechnen Sie ΔV_n explizit für $\delta R = R/100$ und $n = 3, 500, 2000$. Was bedeutet das Ergebnis für die Berechnung der Entropie $S(E)$?

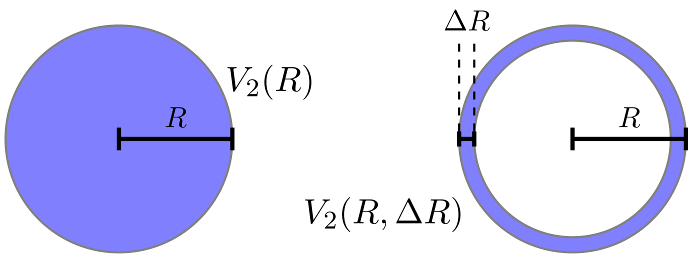

Abbildung 1: Zeigen Sie, dass die hier für $n = 2$ skizzierten Objekte Kugel und Kugelschale im Grenzfall $n \to \infty$ gleich groß sind.

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

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

Leiten Sie eine Rekursionsformel für die Volumina der Einheitssphären $V_n(1)$ her. Das Ergebnis gilt auch für ungerade n. Wird das Volumen für steigende n immer größer? Überprüfen Sie ihr Ergebnis, in dem Sie die Funktion aus Gl. (4) plotten (etwa mit `Julia`).

Aufgabe 9: Klassische harmonische Oszillatoren (Bonusaufgabe) (6 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 Γ_E als $2N$-dimensionales Kugelvolumen auszudrücken. Verwenden Sie dann Gl. (5).

Bemerkung: Γ_E *ist das Phasenraumvolumen der Zustände mit* $H < E$*. Das reduzierte Wirkungsquantum taucht hier auf, um das dimensionsbehaftete Phasenraumvolumen dimensionslos zu machen, wie im Skript auf Seite 21 diskutiert.*

b) Geben Sie für dieses System den Zusammenhang zwischen Energie und Temperatur (*kalorische Zustandsgleichung*).

Aufgabe 10: Elementare Phasenraumzelle (Bonusaufgabe) (4 Punkte)

In der Vorlesung (Skript, S.21/22) wurde der Faktor $1/(2\pi\hbar)$, der das dimensionsbehaftete Phasenraumvolumen in die Anzahl an Mikrozuständen überführt, mit der Unschärferelation $\Delta p \Delta q \sim h$ motiviert. Diese fundamentale Einheit $2\pi\hbar$ der Phasenraumvolumina wollen wir hier erneut motivieren, 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 $H(q,p) = E$ im Phasenraum? Wie groß ist das von dieser Kurve eingeschlossene Phasenraumvolumen $\Gamma(E)$?

b) Bestimmen Sie die Zahl der Zustände $\Omega_{\text{qm}}(E)$ 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* $\Omega_{\text{qm}}(E)$ *eine große Besetzungszahl* n *des Oszillators an.*