UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Statistischen Mechanik
Wintersemester 2007/08

Übungsblatt 5, Ausgabe 20.11.2007, abzugeben bis 26.11.2007

Präsenzaufgaben

24. **Virialsatz und Gleichverteilungssatz**
Es sei ein *beliebiges* klassisches System aus N Teilchen gegeben, das durch den Satz kanonischer Variablen $\{r_i\,,\,p_i\}$ mit $i = 1, \ldots, 3N$ beschrieben wird. Der Index i soll hier nicht über die Teilchen, sondern über die einzelnen Freiheitsgrade laufen. Die Statistik sei durch die kanonische Verteilung gegeben.

(a) Zeigen Sie die folgende Beziehung (keine Summenkonvention)

$$\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\rangle = \langle r_i \frac{\partial H}{\partial r_i}\rangle = k_B T$$

Hinweis: Benutzen Sie die Identität $\frac{\partial H}{\partial x_i} e^{-\beta H} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial x_i} e^{-\beta H}$ $(x_i \in r_i, p_i)$ sowie partielle Integration. Obige Gleichung ist seit Clausius (1870) als *Virialsatz* bekannt. Die Größe $r_i \frac{\partial H}{\partial r_i}$ wird als *Virial* der Kraft $F_i = -\frac{\partial H}{\partial r_i}$ bezeichnet.

(b) Falls eine kanonische Variable x_i (also r_i oder p_i) quadratisch in H eingeht, gilt für ihren Beitrag zur mittleren Energie:

$$\langle H_{x_i}\rangle = \frac{k_B T}{2}.$$

Zeigen Sie das. Dies ist der *Gleichverteilungssatz*, der nur in der klassischen Statistik gilt. Was ist demnach die mittlere Energie eines idealen Gases aus N Teilchen und eines Systems aus N unabhängigen harmonischen Oszillatoren ?

(c) Mit Hilfe des Virialsatzes kann man eine allgemeine Zustandsgleichung ableiten. Dazu betrachte man ein System mit $H = E_{kin} + V$. Die kinetische Energie sei $E_{kin} = \sum_i p_i^2/2m$ und das Potential $V = V_{in} + V_w$, wobei V_{in} die Wechselwirkung der Teilchen untereinander und V_w die Wechselwirkung mit der Wand beschreiben sollen.

i. Zeigen Sie mit Hilfe des Virialsatzes und des Gleichverteilungssatzes, dass gilt:

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} r_i \frac{\partial H}{\partial r_i} \right\rangle = 2\,\langle E_{kin}\rangle$$

ii. Betrachten Sie nun das mittlere Gesamtvirial auf der linken Seite der letzten Gleichung und separieren Sie die Beiträge von V_{in} und V_w. Der Beitrag des V_w kann mit dem Druck in Verbindung gebracht werden. Dazu nimmt man sinnvollerweise an, dass sich V_w nur in unmittelbarer Nähe der Wand bemerkbar macht und nutzt dann den Gauss-Satz aus. Das Ergebnis lautet:

$$PV = \frac{2}{3}\langle E_{kin}\rangle - \frac{1}{3}\sum_i \left\langle r_i \frac{\partial V_{in}}{\partial r_i} \right\rangle.$$

Dies ist die gesuchte allgemeine *Zustandsgleichung* für ein nichtideales System.

25. **Barometrische Höhenformel**
Betrachten Sie ein ideales Gas bestehend aus N Teilchen der Masse m im homogenen Schwerefeld. Das Gas soll sich in einem halb unendlichen, nach oben geöffneten Zylinder mit Grundfläche A befinden. Gehen Sie von der kanonischen Verteilungsfunktion aus:

$$\rho(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\}) = \frac{1}{Z}\, e^{-\beta H}.$$

(a) Bestimmen Sie die mittlere Dichte des Gases in Abhängigkeit von der Höhe z. Benutzen Sie hierzu den mikroskopischen Ausdruck für die Teilchenzahldichte:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

und führen Sie eine Mittelung über den Phasenraum mit Hilfe der oben angegebenen kanonischen Verteilungsfunktion aus.

(b) Benutzen Sie nun die Zustandsgleichung des idealen Gases, um auch die Höhenabhängigkeit des Druckes zu finden. Machen Sie sich klar, dass das Ergebnis dem Kräftegleichgewicht in einer dünnen horizontalen Gasschicht entspricht.

schriftlich

26. **Typische Zustände (4 Punkte)**
In einem thermodynamischen System mit diskreten Energiewerten E_n sei die Wahrscheinlichkeit eines Mikrozustandes gegeben durch die kanonische Verteilungsfunktion:

$$p_n = \frac{1}{Z}\, e^{-\beta E_n} \qquad \text{mit} \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

a) Schreiben Sie p_n mit Entropie S und mittlerer Energie $\langle E\rangle$ statt mit Z, indem Sie den allgemeinen Zusammenhang zwischen Z, $\langle E\rangle$ und S verwenden. Zeigen Sie damit, dass die Wahrscheinlichkeit für einen typischen Zustand, d.h. die Wahrscheinlichkeit der Besetzung eines Energieniveaus E_n, welches nahe an der mittleren Energie liegt $|E_n - \langle E\rangle| \leq N\epsilon$, in folgenden Grenzen liegt:

$$e^{-S/k_B - \beta N\epsilon} \leq p_n \leq e^{-S/k_B + \beta N\epsilon}$$

b) Zeigen Sie für die spezifische Wärme ($\beta = 1/k_B T$):

$$C = \partial E/\partial T = k_B \beta^2 \langle (E_n - \langle E\rangle)^2\rangle = k_B \beta^2 \sum_n \left(E_n - \langle E\rangle\right)^2 p_n$$

c) Verwenden Sie, dass die spezifische Wärme extensiv ist und mit der Teilchenzahl skaliert, um zu zeigen, dass im thermodynamischen Grenzfall die untypischen Zustände verschwindendes Gewicht besitzen, d.h. $\sum_n' p_n \to 0$, dass die Summe der Wahrscheinlichkeiten aller Zustände, die nicht nahe an der mittleren Energie liegen (angedeutet durch $'$), gegen Null geht. Begründen Sie damit, dass im thermodynamischen Grenzfall alle typischen Zustände (fast) gleiche Wahrscheinlichkeit besitzen, und dass die Entropie die Anzahl der typischen Zustände misst.

27. **Stirlingsche Formel (4 Punkte)**
Die Stirlingsche Formel gibt eine Näherung von $x!$ für grosse Werte von x.

(a) Zeigen Sie die Darstellung der Gamma–Funktion als Integral

$$x! = \int_0^\infty dt\, t^x e^{-t} = \int_0^\infty dt\ \exp(x\ln(t) - t).$$

Skizzieren Sie die Funktionen $f(t;x) = x\ln(t) - t$ und $\exp(f(t;x))$ gegen t für ansteigende Werte von x. Was fällt Ihnen auf?

(b) Für welchen Wert von t nimmt der Integrand sein Maximum an? Entwickeln Sie $f(t;x)$ als Taylorreihe um diesen Punkt, um die folgende Näherung für den Integranden zu finden:

$$e^{f(t;x)} \sim e^{x\ln(x)-x} e^{-u^2/(2x^2)} e^{u^3/(3x^3)-u^4/(4x^3)},$$

wobei $u = t - x$. Entwickeln Sie die dritte Exponentialfunktion in eine Taylorreihe um $u = 0$ und leiten Sie somit die ersten zwei Terme in der Stirlingschen Formel ab:

$$x! \sim \sqrt{2\pi x}\, x^x e^{-x}\left(1 + \frac{1}{12x}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{x^2}\right).$$

Das Ergebnis ist ein Beispiel für eine asymptotische Formel, welche hier durch die 'Sattelpunktsmethode' ('method of steepest descents') bestimmt wurde.

28. **Zustandssumme des eindimensionalen Ising Modells (4 Punkte)**
Das Ising–Modell ist eines der bekanntesten Modelle der Statistischen Mechanik, da es (in Speziallfällen) lösbar ist und in höheren Dimensionen zu Phasenübergängen führt. Es soll die eindimensionale Version ohne angelegtem Magnetfeld studiert werden, die durch den Ausdruck für die 'Ising'–Energie festgelegt ist:

$$H = -J\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1},$$

wobei $J > 0$. Die Variablen S_i können hier als klassische Variablen betrachten werden, die (nur) die Werte $S_i = \pm 1$ annehmen können. H beschreibt eine Kette von Spins (mit zur Vereinfachung freien Randbedingungen).

(a) Die kanonische Zustandssumme ist gegeben durch:

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{-\beta H}.$$

und enthält die Kopplung eines Spins i an seinen Nachbarn $i+1$. Definieren Sie die Variablen $\eta_i = S_i S_{i+1}$, um Z durch Auswertung von unabhängigen Summationen zu bestimmen. Welche Werte können die η_i annehmen? Welches Set von neuen Variablen erlaubt es Ihnen alle Zustände des Systems zu charakterisieren? Wie lautet der Zusammenhang zwischen neuen und alten Variablen? Begründen Sie, wie durch Summierung über alle η_i die ursprüngliche Summe für Z bestimmt werden kann.

(b) Skizieren Sie $\ln(Z)$ als Funktion von βJ und vergleichen Sie mit dem Ergebnis von Aufgabe 17.

29. **Polymermodell (3 Punkte)**
Betrachtet werde ein einfaches Modell eines Polymermoleküls, welches in einem Lösungsmittel bei gegebener Temperatur schwimmt. N identische Segmente der Länge l seien in einer Kette miteinander verbunden, so dass die Richtung jedes Segments von den Orientierungen aller anderen Segmente unabhängig ist; der 'End-zu-End' Vektor $\mathbf{R}$ (siehe Figur) setzt sich damit aus den Segmentvektoren $\mathbf{l}_i$ der Segmente $i = 1, \ldots, N$ zusammen über

$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{l}_i$$

Auf das Polymer wirke eine Kraft $\mathbf{f}$, welche das Polymermolekül auseinanderzieht, so dass die Energie gegeben ist durch $E = -\mathbf{f} \cdot \mathbf{R}$.

Bestimmen und diskutieren Sie die Zustandsumme, mittlere Gesamtlänge $\langle R \rangle$, und die 'elastische Konstante' $k = \partial \langle R \rangle / \partial f|_{f=0}$ als Funktion der Stärke f der Kraft.
Hinweis: Sie können diese Aufgabe ohne Rechnung lösen.