5. Rechenübung aus Statistischer Physik (Lösung)

1. (a) Kanonische Zustandssumme

$$\begin{aligned}
Z_c(V,T,N) &= \frac{1}{2\,N!h^{4N}} \int e^{-\beta H} d^N\vec{R} d^N\vec{p}_R d^N r d^N p_r d^N\theta d^N L \\
&= \frac{1}{2\,N!h^{4N}} \left(\int e^{-\beta p_x^2/(2M)} dp_x \int e^{-\beta p_y^2/(2M)} dp_y \int e^{-\beta L^2/(2I)} dL \right. \\
&\quad \left. \times \int e^{-\beta p_r^2/(2\mu)} dp_r \int e^{-\beta K(r-r_0)^2/2} dr \int_V d\vec{R} \int_0^{2\pi} d\theta \right)^N \\
&= \frac{(2\pi V)^N}{2\,N!h^{4N}} \left(\frac{2\pi M}{\beta} \sqrt{\frac{2\pi I}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi\mu}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta K}} \right)^N \\
&= \frac{(2\pi V)^N}{2\,N!h^{4N}} (2\pi)^{5N/2} M^N \left(\frac{\mu I}{K} \right)^{N/2} \beta^{-5N/2}
\end{aligned}$$

(b) Zustandsdichte

$$D_0(E) = \frac{1}{2\,N!h^{4N}} \frac{d\Phi(E)}{dE} = \frac{(2\pi V)^N}{2\,N!h^{4N}} M^N \left(\frac{\mu I}{K} \right)^{N/2} \frac{(2\pi)^{5N/2} E^{5N/2-1}}{\Gamma(5N/2)}$$

Laplace-Transformation der Zustandsdichte :

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty e^{-\beta E} D_0(E) dE &= \frac{(2\pi V)^N}{2\,N!h^{4N}} M^N \left(\frac{\mu I}{K} \right)^{N/2} \frac{(2\pi)^{5N/2}}{\Gamma(5N/2)} \int_0^\infty e^{-\beta E} E^{5N/2-1} dE \\
&= \frac{(2\pi V)^N}{2\,N!h^{4N}} M^N \left(\frac{\mu I}{K} \right)^{N/2} \frac{(2\pi)^{5N/2}}{\Gamma(5N/2)} \beta^{-5N/2} \underbrace{\int_0^\infty e^{-t} t^{5N/2-1} dt}_{=\Gamma(5N/2)} \\
&= \frac{(2\pi V)^N}{2\,N!h^{4N}} M^N \left(\frac{\mu I}{K} \right)^{N/2} \frac{(2\pi)^{5N/2}}{\beta^{5N/2}} \\
&= Z_c(V,T,N)
\end{aligned}$$

(Energieverteilung des kanonischen Ensemble)

$$\rho(E) = \frac{1}{Z_c} e^{-\beta E} D_0(E) = \frac{1}{\Gamma(5N/2)} \beta^{5N/2} e^{-\beta E} E^{5N/2-1}$$

(c) Mittlere Energie

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \frac{1}{Z_c} \frac{1}{2\,N!h^{4N}} \int H e^{-\beta H} d^N\vec{R} d^N\vec{p}_R d^N r d^N p_r d\theta d^N L \\
&= \frac{1}{Z_c} \frac{1}{2\,N!h^{4N}} \left(-\frac{\partial}{\partial\beta} \int e^{-\beta H} d^N\vec{R} d^N\vec{p}_R d^N r d^N p_r d\theta d^N L \right)_{V,N} \\
&= -\frac{1}{Z_c} \left(\frac{\partial Z_c}{\partial\beta} \right)_{V,N} \\
&= -\left(\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z_c \right)_{V,N} \left(= \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta F) \right) \\
&= \frac{5}{2} N k_B T
\end{aligned}$$

alternative Lösung:

$$\begin{aligned}
\langle E\rangle &= \int E\rho(E)dE \\
&= \frac{1}{\Gamma(5N/2)}\beta^{5N/2}\int e^{-\beta E}E^{5N/2}dE \\
&= \frac{1}{\Gamma(5N/2)}\beta^{-1}\int e^{-t}t^{5N/2}dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(5N/2)}\beta^{-1}\Gamma(5N/2+1) \\
&= \frac{5}{2}Nk_BT
\end{aligned}$$

(d) Die Abweichung der Energie ist $\langle(\Delta E)^2\rangle = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2$. Wir bestimmen jetzt den Mittelwert $\langle E^2\rangle$.

$$\begin{aligned}
\langle E^2\rangle &= \frac{1}{Z_c}\frac{1}{2\,N!h^{4N}}\int H^2 e^{-\beta H}d^N\vec{R}d^N\vec{p}_R d^N r d^N p_r d\theta d^N L \\
&= \frac{1}{Z_c}\frac{1}{2\,N!h^{4N}}\left(\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\int e^{-\beta H}d^N\vec{R}d^N\vec{p}_R d^N r d^N p_r d\theta d^N L\right)_{V,N} \\
&= \frac{1}{Z_c}\left(\frac{\partial^2 Z_c}{\partial\beta^2}\right)_{V,N} \\
&= \frac{1}{Z_c}\left(\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\frac{5}{2}N\beta^{-1}Z_c\right)\right)_{V,N} \\
&= \frac{1}{Z_c}\left(\frac{5}{2}N\beta^{-2}Z_c + \frac{25}{4}N^2\beta^{-2}Z_c\right) \\
&= \left(\frac{5}{2}N + \frac{25}{4}N^2\right)k_B^2T^2
\end{aligned}$$

alternative Rechnung:

$$\begin{aligned}
\langle E^2\rangle &= \int E^2\rho(E)dE \\
&= \frac{1}{\Gamma(5N/2)}\beta^{5N/2}\int e^{-\beta E}E^{5N/2+1}dE \\
&= \frac{1}{\Gamma(5N/2)}\beta^{-2}\int e^{-t}t^{5N/2+1}dt \\
&= \frac{1}{\Gamma(5N/2)}\beta^{-2}\Gamma(5N/2+2) \\
&= \frac{5}{2}N\left(\frac{5}{2}N+1\right)k_B^2T^2
\end{aligned}$$

Aus dem Ergebnis von (a) $\langle E\rangle^2 = [(5/2)Nk_BT]^2$. Deshalb

$$\langle(\Delta E)^2\rangle = \langle E^2\rangle - (\langle E\rangle)^2 = \frac{5}{2}Nk_B^2T^2\,.$$

Im Limes $N\to\infty$

$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta E)^2\rangle}}{\langle E\rangle} = \sqrt{\frac{2}{5N}} \to 0\,.$$

alternative Lösung :

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta E)^2\rangle &= \langle E^2\rangle - (\langle E\rangle)^2 \\
&= \frac{1}{Z_c}\left(\frac{\partial^2 Z_c}{\partial \beta^2}\right)_{V,N} - \left[\frac{1}{Z_c}\left(\frac{\partial Z_c}{\partial \beta}\right)_{V,N}\right]^2 \\
&= \left(\frac{\partial^2 \ln Z_c}{\partial \beta^2}\right)_{V,N} \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial \beta}\left(-\frac{5}{2}N\beta^{-1}\right)\right)_{V,N} \\
&= \frac{5}{2}Nk_B^2T^2
\end{aligned}$$

(e) Die nötige Wärmemenge bei konstantem Druck und konstanter Teilchenzahl ist

$$\Delta Q = \Delta E + P\Delta V = E(P,T_2,N) - E(P,T_1,N) + PV(P,T_2,N) - PV(P,T_1,N)$$

Die Energie $\langle E\rangle = (5/2)Nk_BT$ ist unabhängig von P (oder V). Deshalb sind die Energieänderungen bei konstantem Druck und bei konstantem Volumen gleich (d.h. $E(V,T,N) = E(P,T,N)$).

$$\Delta E = \frac{5}{2}Nk_B(T_2 - T_1)$$

Jetzt schreiben wir das Volumen V als eine Funktion von (P,T,N) an.

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} = k_BT\frac{\partial \ln Z_c}{\partial V} = \frac{N}{V}k_BT$$

Es folgt

$$V(P,T,N) = \frac{1}{P}Nk_BT\,.$$

Die Volumenänderung ist

$$\Delta V = \frac{1}{P}Nk_B(T_2 - T_1)$$

Die nötige Wärmemenge ist die Summe von der Energieänderung und der Arbeit

$$W = \Delta E + P\Delta V = \frac{5}{2}Nk_B(T_2 - T_1) + Nk_B(T_2 - T_1) = \frac{7}{2}Nk_B(T_2 - T_1)$$