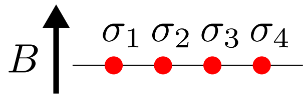
Lösungen zum 4. Tutorium VU Statistische Physik I, 4.5.2018



1. **Mikrokanonische Zustandssumme**

   Ein System bestehe aus vier magnetischen Dipolen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$, welche an vier diskreten Punkten $i = 1, 2, 3, 4$ lokalisiert seien. Das magnetische Moment jedes Dipols kann nur die beiden diskreten Werte $\sigma_i \in \{-\mu, +\mu\}$ annehmen. Mit dem Magnetfeld B lautet die Hamiltonfunktion des Systems

   $$H = -B \sum_{i=1}^{4} \sigma_i.$$

   a) Bestimmen Sie alle möglichen Werte der Gesamtenergie E, sowie die mikrokanonische Zustandssumme Ω für jede dieser Energien. Für welchen Energiewert ist die Entropie des Systems am größten?

   Lösung:

   Mögliche Energiewerte sind $E \in \{-4\mu B, -2\mu B, 0, 2\mu B, 4\mu B\}$. Die zugehörige Zustandssumme ist gegeben durch $\Omega_1(4\mu B) = \Omega_1(-4\mu B) = 1$, $\Omega_1(2\mu B) = \Omega_1(-2\mu B) = 4$, $\Omega_1(0) = 6$.

   b) Dieses System sei nun mit einem weiteren System aus drei magnetischen Dipolen im thermischen Kontakt. Wie lautet die mikrokanonische Zustandssumme des Gesamtsystems zur Energie $E = 3\mu B$.

   Lösung:

   Mögliche Energiewerte für das System mit drei Spins sind

   $$E \in \{-3\mu B, -\mu B, \mu B, 3\mu B\}$$

   mit der Zustandsumme

   $$\Omega_2(3\mu B) = \Omega_2(-3\mu B) = 1$$
   $$\Omega_2(\mu B) = \Omega_2(-\mu B) = 3.$$

   Die gesamte Anzahl an Zuständen zur Gesamtenergie $E = 3\mu B$ ergibt sich also zu

   $$\Omega(3\mu B) = \Omega_1(4\mu B)\Omega_2(-\mu B) + \Omega_1(2\mu B)\Omega_2(\mu B) + \Omega_1(0)\Omega_2(3\mu B) = 21.$$

   c) Wenn jeder Mikrozustand zur Energie $E = 3\mu B$ gleich wahrscheinlich ist, welche Energieaufteilung zwischen den beiden Systemen ist dann am wahrscheinlichsten?

   Lösung:

   Die wahrscheinlichste Energieaufteilung $E = 2\mu B + \mu B$ ist die mit den meisten Mikrozuständen $\Omega_1(2\mu B)\Omega_2(\mu B) = 12$.

2. **Gleichgewicht**

In einem abgeschlossenen Gesamtsystem befinde sich ein ideales Gas mit Teilchenmasse m, Energie E, Volumen V und Teilchenzahl N, welches durch eine unbewegliche, wärmeleitende Trennwand in zwei Teilsysteme geteilt wird. Insgesamt gilt $E = E_1 + E_2$, $V = V_1 + V_2$ und $N = N_1 + N_2$.

a) Berechnen Sie die mikrokanonische Zustandssumme des ersten und zweiten Teilsystems $\Omega_1(E_1, V_1, N_1)$, $\Omega_2(E_2, V_2, N_2)$ sowie des Gesamtsystems $\Omega(E, V, N)$.

Lösung:

Ausführung der Phasenraumintegrale in den beiden Teilsystemen ergibt:

$$\Omega(E_1, V_1, N_1) = \frac{1}{N_1! h^{3N_1}} \frac{V_1^{N_1} (2m\pi)^{3N_1/2}}{\Gamma(\frac{3N_1}{2})} E_1^{\frac{3N_1}{2}-1}$$

$$\Omega(E_2, V_2, N_2) = \frac{1}{N_2! h^{3N_2}} \frac{V_2^{N_2} (2m\pi)^{3N_2/2}}{\Gamma(\frac{3N_2}{2})} E_2^{\frac{3N_2}{2}-1}$$

Die Zustandssumme des Gesamtsystems ist geben durch:

$$\Omega(E, V, N) = \frac{1}{N_1! N_2! h^{3N}} \frac{V_1^{N_1} V_2^{N_2} (2m\pi)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2})} E^{\frac{3N}{2}-1}$$

Bitte beachten Sie, dass hier der Vorfaktor $\frac{1}{N_1! N_2!}$ verwendet werden muss. Die Teilchen im ersten Teilsystem unterscheiden sich ja von den Teilchen im rechten Teilsystem dadurch, dass sie nur um ersten Volumen V_1 sein können, während die Teilchen im zweiten Teilsystem nur im zweiten Volumen V_2 sein können.

Anmerkung:

Entfernt man die Trennwand so ergibt sich die neue Zustandssumme

$$\Omega^{\text{no wall}}(E, V, N) = \frac{1}{N! h^{3N}} \frac{V^N (2m\pi)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2})} E^{\frac{3N}{2}-1}.$$

Die Änderung der Entropie durch das Entfernen der Trennwand ist gegeben durch

$$\Delta S = k_B \ln \Omega^{\text{no wall}} - k_B \ln \Omega = k_B \ln \left(\frac{V^N}{N!} \right) - k_B \left(\frac{V_1^{N_1} V_2^{N_2}}{N_1! N_2!} \right).$$

Mithilfe der Stirling-Formel $N! \simeq N^N e^{-N}$ ergibt sich

$$\Delta S = k_B N \ln \left(\frac{V}{N} \right) - k_B N_1 \ln \left(\frac{V_1}{N_1} \right) - k_B N_2 \ln \left(\frac{V_2}{N_2} \right).$$

Wenn in beiden Teilsystemen die gleiche Teilchendichte $n = N_1/V_1 = N_2/V_2$ herrscht, dann gilt

$$\Delta S = k_B N \ln \left(\frac{1}{n} \right) - k_B N_1 \ln \left(\frac{1}{n} \right) - k_B N_2 \ln \left(\frac{1}{n} \right) = 0.$$

In diesem Fall ändert sich die Entropie durch das Entfernen der Trennwand nicht. Wenn allerdings in beiden Teilsystemen die Teilchendichte unterschiedlich ist $N_1/V_1 \neq N_2/V_2$ dann kommt es durch das Entfernen der Trennwand zu einem Ausgleichsprozess in dem die Entropie größer wird. Es handelt sich also um einen irreversiblen Prozess.

b) Zeigen Sie die folgende Relation

$$\Omega(E,V,N) = \int_0^E \Omega_1(E_1,V_1,N_1)\Omega_2(E-E_1,V_2,N_2)dE_1.$$

Hinweis: Sie können das Hauptresultat der Theorie der Betafunktionen

$$\int_0^1 t^{x-1}(1-t)^{y-1}dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$$

verwenden oder die Definition der mikrokanonischen Zustandssumme direkt einsetzten.

Lösung:

$$\begin{aligned}
\Omega(E,V,N) &= \int_0^E \Omega_1(E_1,V_1,N_1)\Omega_2(E-E_1,V_2,N_2)dE_1 \\
&= \frac{1}{N_1!N_2!h^{3N}} \int\int_0^E \delta\Big(E_1 - H_1(\underline{q},\underline{p})\Big)\delta\Big(E-E_1-H_2(\underline{q},\underline{p})\Big)dE_1\, d^{3N}p\, d^{3N}q \\
&= \frac{1}{N_1!N_2!h^{3N}} \int \delta\Big(E - H_1(\underline{q},\underline{p}) - H_2(\underline{q},\underline{p})\Big)d^{3N}p\, d^{3N}q
\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}
\Omega(E,V,N) &= \frac{V_1^{N_1}V_2^{N_2}(2m\pi)^{3N/2}}{N_1!N_2!h^{3N}} \frac{1}{\Gamma(\frac{3N_1}{2})\Gamma(\frac{3N_2}{2})} \int_0^E E_1^{\frac{3N_1}{2}-1}(E-E_1)^{\frac{3N_2}{2}-1}dE_1 \\
&= \frac{V_1^{N_1}V_2^{N_2}(2m\pi)^{3N/2}}{N_1!N_2!h^{3N}} \frac{E^{\frac{3N}{2}-2}}{\Gamma(\frac{3N_1}{2})\Gamma(\frac{3N_2}{2})} \int_0^E \left(\frac{E_1}{E}\right)^{\frac{3N_1}{2}-1}\left(1-\frac{E_1}{E}\right)^{\frac{3N_2}{2}-1} dE_1 \\
&= \frac{V_1^{N_1}V_2^{N_2}(2m\pi)^{3N/2}}{N_1!N_2!h^{3N}} \frac{E^{\frac{3N}{2}-1}}{\Gamma(\frac{3N_1}{2})\Gamma(\frac{3N_2}{2})} \int_0^1 t^{\frac{3N_1}{2}-1}(1-t)^{\frac{3N_2}{2}-1}dt \\
&= \frac{1}{N_1!N_2!h^{3N}} \frac{V_1^{N_1}V_2^{N_2}(2m\pi)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2})} E^{\frac{3N}{2}-1}
\end{aligned}$$

Anmerkung:

Es gab kurz die Verwirrung, dass in diesem Beispiel in der Gleichung

$$\Omega(E,V,N) = \int_0^E \Omega_1(E_1,V_1,N_1)\Omega_2(E-E_1,V_2,N_2)dE_1$$

ein Vorfaktor $\frac{N_1!N_2!}{N!}$ notwendig ist. Dem ist **nicht** so!

c) Die (normierte) Wahrscheinlichkeitsdichte das Gas im ersten Teilsystem bei der Energie E_1 zu finden ist gegeben durch

$$w(E_1) = \frac{\Omega_1(E_1, V_1, N_1)\Omega_2(E - E_1, V_2, N_2)}{\Omega(E, V, N)}.$$

Bestimmen Sie den wahrscheinlichsten Wert für E_1. Welcher Temperatur entspricht das in den beiden Teilsystemen?

Lösung:

Der wahrscheinlichste Wert für die Energie des ersten Teilsystems $\hat{E}_1$ ergibt sich zu

$$\frac{\partial}{\partial E_1}\Omega_1(E_1, V_1, N_1)\Omega_2(E - E_1, V_2, N_2) = 0$$
$$\rightarrow \hat{E}_1 = \frac{3N_1 - 2}{3N_1 + 3N_2 - 4}E \approx \frac{N_1}{N_1 + N_2}E$$

Dies entspricht dem thermischen Gleichgewicht, welches durch eine homogene Temperatur gekennzeichnet ist

$$\frac{\hat{E}_1}{N_1} = \frac{\hat{E}_2}{N_2} \rightarrow T_1 = T_2.$$

d) Berechnen Sie für Helium die Entropie des Gesamtsystems für $N_1 = N_2 = 10^{23}$ und $V_1 = V_2 = 1\text{m}^3$ bei der Gesamtenergie $E = 1000$ J. Wie vielen Mikrozuständen entspricht das? Berechnen Sie weiters die Entropie des ersten und des zweiten Teilsystems für den wahrscheinlichsten Wert der Energieaufspaltung.

Hinweis: Verwenden Sie $S = k_B \ln(\Omega) \overset{N\to\infty}{\simeq} k_B \ln(\Phi)$.

Lösung:

Einsetzen der Zahlenwerte in $S = k_B \ln(\Phi)$ ergibt $S \approx 56$ J/K. Für die Entropie der beiden Teilsysteme erhält man jeweils genau die Hälfte $S \approx 28$ J/K. Dies zeigt, dass die Entropie mit der Approximation für große Teilchenzahlen eine extensive Größe ist. Die Anzahl der Mikrozustände berechnet sich zu $\Phi \approx 10^{10^{24}}$, eine **unvorstellbar!** große Zahl.

3. **Vorbereitung auf das kanonische Ensemble**

   a) Zeigen Sie, dass jede Phasenraumdichte $\rho(\underline{q},\underline{p}) = \rho\big(H(\underline{q},\underline{p})\big)$ die nur von der Hamiltonfunktion $H(\underline{q},\underline{p})$ abhängt stationär ist.

   Lösung:

   Einsetzten in die Liouville Gleichung ergibt:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} = \{H,\rho\} &= \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial \rho}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial \rho}{\partial q_i}\right)\\ &= \rho'\big(H(\underline{q},\underline{p})\big)\sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)\\ &= 0\end{aligned}$$

Gegeben ist eine normierte Wahrscheinlichkeitsverteilung $g(x,y) = \frac{1}{Z}e^{-a[f(x)+by]}$ mit kontinuierlichen reellen Variablen x und y.

   b) Zeigen Sie, dass der Mittelwert von y gegeben ist durch

$$\langle y\rangle = -\frac{1}{a}\frac{\partial}{\partial b}\ln Z.$$

   Lösung:

   Der Normierungsfaktor berechnet sich zu

$$Z(a,b) = \int e^{-a[f(x)+by]}dxdy.$$

   In seiner Abhängigkeit von a, b steckt sehr viel Information!

$$\begin{aligned}\langle y\rangle &= \int y\,g(x,y)dxdy = \frac{1}{Z}\int y\,e^{-a[f(x)+by]}\,dxdy\\ &= \frac{1}{Z}\int -\frac{1}{a}\frac{\partial}{\partial b}e^{-a[f(x)+by]}\,dxdy\\ &= -\frac{1}{a}\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial b}Z = -\frac{1}{a}\frac{\partial}{\partial b}\ln(Z).\end{aligned}$$

   c) Zeigen Sie, dass der Mittelwert von $f(x)$ gegeben ist durch

$$\langle f(x)\rangle = -\frac{\partial}{\partial a}\ln Z - b\langle y\rangle.$$

   Lösung:

$$\begin{aligned}\langle f(x)\rangle &= \int f(x)\,g(x,y)dxdy = \frac{1}{Z}\int f(x)\,e^{-a[f(x)+by]}\,dxdy\\ &= \frac{1}{Z}\int\left(-\frac{\partial}{\partial a} - by\right)e^{-a[f(x)+by]}\,dxdy\\ &= -\frac{\partial}{\partial a}\ln Z - b\langle y\rangle\end{aligned}$$