Gerhard Kahl & Florian Libisch

STATISTISCHE PHYSIK 1 (VU – 136.020)

4. Tutoriumstermin (8.4.2022)

T11. **(a)** Berechnen Sie für das Tonks-Gas (vgl. T8 aus der 3. Tutoriumseinheit) die sogenannte Einteilchenverteilungsfunktion des l-ten Teilchens (mit $l = 1, ..., N$) im kanonischen Ensemble, also

$$w_T''(q_0) = \langle \delta(q_l - q_0) \rangle_k$$

Um welche Verteilungsfunktion handelt es sich?

(b) Führen Sie die entsprechende Rechnung für ein System von N idealen Gasteilchen durch, das ebenfalls bei $x = 0$ und $x = L$ durch undurchdringliche Wände begrenzt ist. Um welche Verteilungsfunktion handelt es sich bei dieser Funktion?

(c) Vergleichen und interpretieren Sie die beiden Ergebnisse.

Lösung

(a) Wir haben unseren Phasenraum und unsere Hamiltonfunktion:

$$\Gamma = \{(p^N, q^N)\big| 0 \leq q_1 \leq q_2 \leq ... \leq q_N \leq L, p_i \in \mathbb{R}\} \quad , \quad H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m}$$

Nun berechnen wir unsere kanonische Zustandssumme:

$$Z_k = \frac{1}{h^N} \int_\Gamma dp^N dq^N \, e^{-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}} = \frac{1}{h^N} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \right)^N}_{\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}}} \underbrace{\int_{0 \leq q_1 \leq q_2 \leq ... \leq q_N \leq L} dq^N}_{\frac{L^N}{N!}} =$$

$$= \frac{1}{N! h^N} \cdot \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot L^N$$

Wir berechnen die Einteilchenverteilungsfunktion des l-ten Teilchens:

$$
\begin{aligned}
w''_T(q_0) &= \langle \delta(q_l - q_0) \rangle_k = \frac{1}{h^N} \frac{1}{Z_k} \int_\Gamma dp^N dq^N \, \delta(q_l - q_0) e^{-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}} = \\
&= \frac{N!}{L^N} \left(\frac{\beta}{2m\pi} \right)^{\frac{N}{2}} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \right)^N}_{\left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}}} \int_{0 \le q_1 \le q_2 \le \ldots \le q_N \le L} dq^N \, \delta(q_l - q_0) = \\
&= \frac{N!}{L^N} \int_{0 \le q_1 \le \ldots \le q_{l-1} \le q_0 \le q_{l+1} \le \ldots \le q_N \le L} dq^{N-1} = \\
&= \frac{N!}{L^N} \underbrace{\int_{q_0}^{L} dq_N \int_{q_0}^{q_N} dq_{N-1} \ldots \int_{q_0}^{q_{l+2}} dq_{l+1}}_{\frac{(L-q_0)^{N-l}}{(N-l)!}} \underbrace{\int_0^{q_0} dq_{l-1} \ldots \int_0^{q_2} dq_1}_{\frac{q_0^{l-1}}{(l-1)!}} = \\
&= \frac{N!}{L^N} \frac{(L-q_0)^{N-l}}{(N-l)!} \frac{q_0^{l-1}}{(l-1)!} = \frac{N!}{L^l} \frac{(1-\frac{q_0}{L})^{N-l}}{(N-l)!} \frac{q_0^{l-1}}{(l-1)!} = \\
&= \frac{1}{L} \frac{N!}{(N-l)!(l-1)!} \left(\frac{q_0}{L} \right)^{l-1} \left(1 - \frac{q_0}{L} \right)^{N-l} = \frac{1}{L} B_{l,N-l+1} \left(\frac{q_0}{L} \right)
\end{aligned}
$$

Durch die Bedingung $q_l = q_0$ wird der innere Vertex auf den Bereich $[0, q_0]$ beschränkt (also $0 \le q_1 \ldots \le q_{l-1} \le q_0$ mit Volumen $q^{l-1}/(l-1)!$) und der äußere Vertex auf den Bereich $[q_0, L]$ beschränkt (also $q_0 \le q_{l+1} \ldots \le L$ mit Volumen $(L-q_0)^{N-l}/(N-l)!$]. Insgesamt kommt heraus, daß $w''_T(q_0) = \frac{1}{L} B_{l,N-l+1}(q_0/L)$; das erste Moment dieser Betaverteilung (also der Mittelwert der Verteilung) ist gegeben durch $(N!l!/[(l-1)!(N+1)!]q_0/L = l/(N+1)q_0/L$, was auch intuitiv erklärlich ist.

(b) Wir berechnen die kanonische Zustandssume für ein ideales Gas, bei dem die Gasteilchen nicht miteinander stoßen, unser $\Gamma_{id} = \{(p^N, q^N) \big| q_i \in [0, L], p_i \in \mathbb{R}\}$:

$$
Z_{k,id} = \frac{1}{N! h^N} \int_{\Gamma_{id}} dp^N dq^N \, e^{-\beta H} = \frac{1}{N! h^N} \cdot \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{\frac{N}{2}} \cdot L^N
$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow w''_{T,id}(q_0) &= \langle \delta(q_l - q_0) \rangle_{k,id} = \frac{1}{N! h^N} \frac{1}{Z_{k,id}} \int_{\Gamma_{id}} dp^N dq^N \, \delta(q_l - q_0) e^{-\beta \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}} = \\
&= \frac{1}{L^N} \int_0^L dq^{N-1} \int_0^L dq_l \, \delta(q_l - q_0) = \frac{L^{N-1}}{L^N} \cdot 1 = \frac{1}{L}
\end{aligned}
$$

(c) In Unterpunkt **(a)** ergibt sich für das l-te Teilchen eine Betaverteilung, deren Erwartungswert $E(q_0) = \frac{l}{N+1} L$ sich mit wachsendem l immer weiter nach rechts verschiebt. Dies ist das gleiche Ergebnis das man bekommt, wenn man mit N äquidistanten Teilchen rechnet. Während wir im Unterpunkt **(b)** eine uniforme Verteilungsfunktion erhalten.

T12. Gegeben sei ein ideales Gas im Schwerefeld von N Teilchen der Masse m in einem dreidimensionalen, nach oben offenen Volumen V mit quadratischer Grundfläche (Kantenlänge L). Dieses System steht mit einem Wärmebad der Temperatur T in Kontakt.

Berechnen Sie die Einteilchenverteilungsfunktionen für die Impulskoordinaten des ersten Teilchens, also

$$w'(\tilde{p}_1, \tilde{p}_2, \tilde{p}_3) = \langle \delta(\tilde{p}_1 - p_{11})\delta(\tilde{p}_2 - p_{12})\delta(\tilde{p}_3 - p_{13})\rangle_k,$$

Welche Informationen beinhaltet diese Verteilungsfunktion?

Hinweis: Die Einteilchenverteilungsfunktion für den Impuls ist als **Maxwell-Impulsverteilung** in der Literatur bekannt.

Lösung

Die Situation ist die gleiche wie in Beispiel T10. Die Hamilton-Funktion ist daher durch

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \underbrace{mg \sum_{i=1}^{N} q_{i3}}_{:=V(q^N)}$$

gegeben. In der Notation $(\mathbf{p_1}, \ldots, \mathbf{p_N}) = (p_{11}, p_{12}, p_{13}, p_{21}, \ldots, p_{N\,2}, p_{N\,3}) = (p_1, \ldots, p_{3N})$ führt eine direkte Rechnung zu

$$\begin{aligned}
w'(\tilde{p}_1, \tilde{p}_2, \tilde{p}_3) &= \langle \delta(\tilde{p}_1 - p_1)\delta(\tilde{p}_2 - p_2)\delta(\tilde{p}_3 - p_3)\rangle_k \\
&= \frac{1/(N!h^{3N}) \int_\Gamma \mathrm{d}^{3N}q\, \mathrm{d}^{3N}p\, \delta(\tilde{p}_1 - p_1)\delta(\tilde{p}_2 - p_2)\delta(\tilde{p}_3 - p_3)\, e^{-\beta\mathcal{H}}}{1/(N!h^{3N}) \int_\Gamma \mathrm{d}^{3N}q\, \mathrm{d}^{3N}p\, e^{-\beta\mathcal{H}}} \\
&= \frac{\prod_{i=1}^{3} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_i\, \delta(\tilde{p}_i - p_i)\, e^{-\beta p_i^2/2m} \prod_{j=4}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_j\, e^{-\beta p_j^2/2m} \int_\Pi \mathrm{d}^{3N}q\, e^{-\beta V(q^N)}}{\prod_{i=1}^{3} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_i\, e^{-\beta p_i^2/2m} \prod_{j=4}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_j\, e^{-\beta p_j^2/2m} \int_\Pi \mathrm{d}^{3N}q\, e^{-\beta V(q^N)}} \\
&= \frac{\prod_{i=1}^{3} e^{-\beta\tilde{p}_i^2/2m}}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p\, e^{-\beta p^2/2m}\right)^3} \\
&= \left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2} e^{-\frac{\beta\tilde{\mathbf{p}}^2}{2m}}.
\end{aligned}$$

Die einzelnen Schritte waren: Zerlegung der Exponentialfunktion (und damit auch der Integrale) in Produkte, Auswertung der Delta-Distributionen, Kürzen gleicher Faktoren und Einsetzen eines aus T10 bekannten Integrals. Diese Funktion beschreibt die Impulsverteilung des ersten Teilchens beziehungsweise genauer die Impulsverteilung **eines** beliebigen Teilchens.

Anmerkung: Die Verteilung des Impuls**betrages** kann erhalten werden, indem das Integral

$$\int \mathrm{d}^3p\, \delta(\tilde{p} - |\mathbf{p}|) \left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2} e^{-\frac{\beta\mathbf{p}^2}{2m}} = \cdots = 4\pi \left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2} \tilde{p}^2 e^{-\frac{\beta\tilde{p}^2}{2m}}$$

berechnet wird.

T13. Gegeben ist ein System von F Freiheitsgraden $(z_1, ..., z_F)$, das in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T steht. Die Hamilton-Funktion ist gegeben durch

$$\mathcal{H}(z_1, \ldots, z_F) = \sum_{i=1}^{M} c_i z_i^2 \qquad (1 \leq M \leq F)$$

wobei die z_i die ersten M der F Variablen sind. Jede dieser Variablen kann die Bedeutung eines Impulses oder die einer Lage haben. Die c_i $(i = 1, \ldots, M)$ seien positive Konstanten und der Phasenraum Π ist gegeben durch

$$\Pi = \mathbb{R}^F.$$

Zeigen Sie, daß

$$\langle c_j z_j^2 \rangle_k = \frac{1}{2} k_{\mathrm{B}} T \quad j = 1, \cdots, M.$$

Hinweis: Dieses Ergebnis ist in der Literatur als **Gleichverteilungssatz (Äquipartitionstheorem)** bekannt.

Lösung

Formel für die Mittelwertbildung mit kanonischen Ensemble:

$$< c_j z_j^2 >= \frac{1}{\int dz_1 ... dz_F \exp(-\beta \mathcal{H})} \int dz_1 ... dz_F (c_j z_j^2) \exp(-\beta \mathcal{H}) \tag{1}$$

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{M} c_i z_i^2 \tag{2}$$

Alle Integrale über $dz_i, i \neq j$ sind im Nenner und Zähler gleich. Sie heben sich gegenseitig auf und es bleiben nur mehr die Integrale über dz_j über. Es wird über den gesamten Raum integriert und man kann die Gauß-Integral-Formel anwenden.

$$< c_j z_j^2 >= \frac{1}{\int dz_j \exp(-\beta c_j z_j^2)} \int dz_j (c_j z_j^2) \exp(-\beta c_j z_j^2) = \tag{3}$$

$$= -\frac{1}{\int dz_j \exp(-\beta c_j z_j^2)} \frac{\partial}{\partial \beta} \int dz_j \exp(-\beta c_j z_j^2) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(\int dz_j \exp(-\beta c_j z_j^2)) = \tag{4}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(\sqrt{\frac{\pi}{\beta c_j}}) = -\frac{1}{2} \frac{\beta c_j}{\pi} (-\frac{\pi}{\beta^2 c_j}) = \frac{1}{2} k_B T \tag{5}$$

Zu kreuzen: 11a, 11bc; 12; 13