# Lösungen zum 1. Tutorium VU Statistische Physik II, 11.03.2019

1. **Gleichgewicht und reduzierte Größen**

   Ein dreidimensionales ideales Gas aus $N$ identischen Teilchen, beschrieben durch die Hamilton-Funktion

$$H(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}}) = H(\mathbf{q}_1, ..., \mathbf{q}_N, \mathbf{p}_1, ..., \mathbf{p}_N) = \sum_{i=1}^{N} h(\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i) = \sum_{i=1}^{N} \left( \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q}_i) \right)$$

   mit $V(\mathbf{q}) = \frac{m\omega^2 \mathbf{q}^2}{2}$, befinde sich im thermischen Gleichgewicht mit Temperatur $T$.

   a) Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit $W(E)dE$, die Gesamtenergie $E$ des idealen Gases im Energieintervall $[E, E + dE]$ zu finden.

$$W(E) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int \delta(E - H(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})) \rho_k(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}}) \; d^{3N}q \; d^{3N}p$$

   ***Lösung:*** Die kanonischen Phasenraumdichte $\rho_\mathrm{k}$ ist gegeben durch

$$\rho_\mathrm{k}(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}}) = \frac{1}{Z_\mathrm{k}} e^{-\beta H(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})}.$$

   Damit lässt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte umformen zu

$$\begin{aligned} W(E) &= \frac{1}{N! h^{3N}} \frac{1}{Z_\mathrm{k}} \int \delta(E - H(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})) e^{-\beta H(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})} \; d^{3N}q \; d^{3N}p \\ &= \frac{1}{Z_\mathrm{k}} e^{-\beta E} \underbrace{\frac{1}{N! h^{3N}} \int \delta(E - H(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})) \; d^{3N}q \; d^{3N}p}_{\Omega} = \frac{\Omega}{Z_\mathrm{k}} e^{-\beta E}, \end{aligned}$$

   wobei wir die Definition der mikrokanonischen Zustandsumme $\Omega$ verwendet haben. Berechnung liefert

$$\begin{aligned} Z_\mathrm{k} &= \frac{1}{N! h^{3N}} \int e^{-\beta H(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})} \; d^{3N}q \; d^{3N}p \\ &= \frac{1}{N! h^{3N}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p^2}{2m}} dp \right)^{3N} \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega^2 q^2}{2}} dq \right)^{3N} = \frac{1}{N! h^{3N}} \left( \frac{2\pi}{\beta\omega} \right)^{3N} \\ \Omega &= \frac{1}{N! h^{3N}} \int \delta(E - H(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})) \; d^{3N}q \; d^{3N}p = \frac{1}{N! h^{3N}} \left( \frac{2\pi}{\omega} \right)^{3N} \frac{E^{3N-1}}{\Gamma(3N)} \end{aligned}$$

   und damit abschießend

$$W(E) = \beta^{3N} \frac{E^{3N-1}}{\Gamma(3N)} e^{-\beta E}.$$

b) Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit $w(\epsilon)d\epsilon$, die Einteilchenenergie $\epsilon$ eines zufällig herausgegriffenen Teilchens im Energieintervall $[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$ zu finden.

$$w(\epsilon) = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \delta(\epsilon - h(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1))\rho_k(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})\ d^{3N}q\ d^{3N}p$$

***Lösung:*** Mit der kanonischen Phasenraumdichte lässt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte umformen zu

$$w(\epsilon) = \frac{1}{N!h^{3N}} \frac{1}{Z_{\mathrm{k}}} \int \delta(\epsilon - h(\mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1)) e^{-\beta \sum_i h(\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i)}\ d^{3N}q\ d^{3N} = \frac{\Omega_1}{Z_1} e^{-\beta\epsilon}.$$

Mit

$$Z_1 = \frac{1}{h^3} \int e^{-\beta h(\mathbf{q},\mathbf{p})}\ d^3q\ d^3p = \frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi}{\beta\omega}\right)^3,$$

und

$$\Omega_1 = \frac{1}{h^3} \int \delta(\epsilon - h(\mathbf{q}, \mathbf{p}))\ d^3q\ d^3p = \frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi}{\omega}\right)^3 \frac{\epsilon^2}{2}.$$

erhält man

$$w(\epsilon) = \beta^3 \frac{\epsilon^2}{2} e^{-\beta\epsilon},$$

c) Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit $w(\mathbf{q}', \mathbf{p}')d^3qd^3p$, ein zufällig herausgegriffenes Teilchen mit Impuls $\mathbf{p}'$ am Ort $\mathbf{q}'$ zu finden.

$$w(\mathbf{q}', \mathbf{p}') = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{q}_1)\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_1)\rho_k(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})\ d^{3N}q\ d^{3N}p$$

***Lösung:*** Analog zu Punkt (b) lässt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte umformen zu

$$\begin{aligned} w(\mathbf{q}', \mathbf{p}') &= \frac{1}{N!h^{3N}} \int \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{q}_1)\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_1)\rho_k(\underline{\mathbf{q}}, \underline{\mathbf{p}})\ d^{3N}q\ d^{3N}p \\ &= \frac{1}{h^3 Z_1} e^{-\beta h(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} = \left(\frac{\beta\omega}{2\pi}\right)^3 e^{-\beta\left(\frac{\mathbf{p}'^2}{2m} + V(\mathbf{q}')\right)}, \end{aligned}$$

d) Berechnen Sie aus der 1-Teilchen Verteilungsfunktion $f_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = Nw(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ die Teilchendichte $n(\mathbf{q})$ am Ort $\mathbf{q}$ und zeigen Sie, dass die hydrostatische Gleichgewichtsbedingung

$$\nabla P(\mathbf{q}) + n(\mathbf{q})\nabla V(\mathbf{q}) = 0$$

erfüllt ist. Für den Druck $P$ kann die ideale Gasgleichung verwendet werden.

***Lösung:*** Die 1-Teilchen Verteilungsfunktion $f_1(\mathbf{q},\mathbf{p}) = Nw(\mathbf{q},\mathbf{p})$ führt zur Dichte durch Integration über die Impulskomponenten

$$n(\mathbf{q}) = \int f_1(\mathbf{q},\mathbf{p})d^3p = \frac{N}{Z_1}\int e^{-\beta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{q})\right)}d^3p = N\left(\frac{\beta m\omega^2}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta\frac{m\omega^2\mathbf{q}^2}{2}}.$$

Mit der idealen Gasgleichung lässt sich der Druck schreiben als

$$P(\mathbf{q}) = n(\mathbf{q})k_BT = N\beta^{-1}\left(\frac{\beta m\omega^2}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta V(\mathbf{q})}$$

Anwendung der Kettenregel liefert

$$\nabla P(\mathbf{q}) = N\beta^{-1}\left(\frac{\beta m\omega^2}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \nabla\left(e^{-\beta V(\mathbf{q})}\right) = -N\left(\frac{\beta m\omega^2}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta V(\mathbf{q})}\nabla V(\mathbf{q}),$$

woraus die hydrostatische Gleichgewichtsbedingung $\nabla P(\mathbf{q}) + n(\mathbf{q})\nabla V(\mathbf{q}) = 0$ folgt.

2. **Kinetische Gastheorie**

Ein ideales Gas aus $N$ Teilchen mit Masse $m$ in einem Behälter mit Volumen $V$ sei im thermischen Gleichgewicht mit Temperatur $T$.
**Hinweis:** Die 1-Teilchen Verteilungsfunktion ist gegeben durch

$$f_1(\mathbf{q},\mathbf{p}) = \frac{N}{V}\left(\frac{\beta}{2m\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta\frac{\mathbf{p}^2}{2m}}$$

a) Betrachten Sie ein kleines Flächenelement der Behälterwand $dA$ und berechnen Sie den pro Zeiteinheit auf das Wandelement übertragenen Impuls $d\dot{\mathbf{p}}$. Woher kennen Sie dieses Ergebnis?

***Lösung:*** O. B. d. A. kann man annehmen, dass die Flächennormale entlang der $z$-Achse orientiert ist. Für den übertragene Impuls gilt dann

$$\frac{d\dot{\mathbf{p}}}{dA} = 2\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty\int_{-\infty}^\infty \mathbf{p}\,\frac{p_z}{m}f_1(\mathbf{q},\mathbf{p})dp_xdp_ydp_z$$

Die $x$ und $y$ Komponente verschwindet, so dass nur ein auf die Wand orthogonaler Impulsübertrag stattfindet. Dieser ist gegeben durch

$$\frac{d\dot{p_z}}{dA} = \frac{2}{m}\frac{N}{V}\left(\frac{\beta}{2m\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^\infty p_z^2 e^{-\beta\frac{p_z^2}{2m}}dp_z = \frac{N}{V}\beta^{-1}$$

Der pro Zeit und Fläche übertragene Impuls ist nichts anderes als der Druck $P$. Daraus folgt die thermische Zustandsgleichung $PV = Nk_BT$.

b) In der Behälterwand werde nun ein kleines Loch geöffnet aus dem Gas in ein thermisch isoliertes evakuiertes Gefäß übergehen kann. In der Verbindung zum neuen Gefäßen befinde sich ein Chopper, der nur Teilchen in x-Richtung mit Geschwindigkeit im Intervall $[v_x, v_x + dv_x]$ und $v_y = v_z = 0$ durchlässt. Wie groß ist die mittlere Geschwindigkeit $\langle v \rangle$ der Teilchen im neuen Gefäß, nachdem sich ein thermodynamisches Gleichgewicht eingestellt hat?

***Lösung:*** Die Anzahl der Teilchen im neuen Gefäß nach der Zeit $t$ sei $N(t)$. Jedes Teilchen hat die Energie $\frac{mv_x^2}{2}$, daher ist die Gesamtenergie nach der Zeit $t$ gegeben durch

$$E(t) = N(t)\frac{mv_x^2}{2}.$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht entspricht das der Temeratur

$$\tilde{T} = \frac{2E(t)}{3N(t)k_B} = \frac{mv_x^2}{3k_B}.$$

Mit $\tilde{\beta} = (k_B\tilde{T})^{-1}$ ist die mittlere Geschwindigkeit gegeben durch

$$\begin{aligned}\langle v \rangle &= \left(\frac{\tilde{\beta}}{2m\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int \frac{|\mathbf{p}|}{m} e^{-\tilde{\beta}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}} d^3p = \left(\frac{\tilde{\beta}}{2m\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{4\pi}{m} \int_0^\infty p^3 e^{-\tilde{\beta}\frac{p^2}{2m}} dp \\ &= \left(\frac{\tilde{\beta}}{2m\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{4\pi}{m}\frac{1}{2}\left(\frac{2m}{\tilde{\beta}}\right)^2 = \sqrt{\frac{8k_B\tilde{T}}{\pi m}}.\end{aligned}$$

Daher gilt $\frac{\langle v \rangle}{v_x} = \sqrt{\frac{8}{3\pi}}$.

3. **Diffusion**

Ein kubischer Behälter mit Volumen $L^3$ werde durch eine Trennwand in zwei **identische** Teilsysteme $V_1 = V_2$ geteilt. In beiden Volumina befinde sich die gleiche Anzahl an Teilchen, allerdings seien $M$ homogen verteilte Teilchen im ersten Volumen mit einem radioaktiven Marker versehen. Nun wird die Trennwand abrupt entfernt. Infolge der thermischen Bewegung wird die Konzentration an markierten Teilchen $c(\mathbf{r}, t) = \frac{dM}{dV}$ eine zeit- und ortsabhängige Größe. Nehmen Sie an, der Ausgleichsprozess werde durch das (zweite) Fick'sche Gesetz

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c$$

beschrieben und zeigen Sie, dass die Änderung der Anzahl markierter Teilchen im ersten Volumen gegeben ist durch

$$\dot{M}_1(t) = -\frac{4MD}{L^2}\sum_{k=0}^{\infty} e^{-D\lambda_k^2 t} \qquad \text{mit} \qquad \lambda_k = (2k+1)\frac{\pi}{L}.$$

**Hinweis**: Reduzieren Sie das Problem auf eine Dimension. Es gilt

$$\int_0^{\frac{L}{2}} \cos(\lambda_k x) dx = (-1)^k \frac{L}{(2k+1)\pi}.$$

***Lösung:*** Das Problem kann eindimensional betrachtet werden, da es nur einen Gradienten in x-Richtung gibt. Die Anfangsbedingung für $c(x,t)$ ist

$$c(x,0) = \begin{cases} \frac{2M}{L} & 0 \leq x \leq \frac{L}{2} \\ 0 & \frac{L}{2} \leq x \leq L \end{cases}$$

Um die Differentialgleichung $\partial_t c(x,t) = D\partial_x^2 c(x,t)$ zu lösen verwenden wir einen Produktansatz $f(x,t) = X(x)T(t)$ und erhalten durch Einsetzen

$$\frac{1}{D}\frac{1}{T}\partial_t T = \frac{1}{X}\partial_x^2 X = \text{const} = -\lambda^2$$

Die Zeitgleichung lässt sich lösen über:

$$\partial_t T = -D\lambda^2 T \rightarrow T(t) = e^{-D\lambda^2 t}.$$

Für die Ortsgleichung erhalten wir

$$\partial^2 X = -\lambda^2 X.$$

Die Lösungen dieser Differentialgleichung sind

$$X(x) = C\cos(\lambda x) + C' \sin(\lambda x).$$

Da es am Rand keinen Teilchenstrom gibt muss die Ableitung der Konzentration dort verschwinden $X'(0) = X'(L) = 0$. Daraus folgt

$$X(x) = C\cos(\lambda_n x)$$

mit $\lambda_n = n\frac{\pi}{L}$ und $n \in \{0,1,2,3,...\}$. Eine Lösungsbasis ist also gegeben durch die Funktionen

$$f_0(x,t) = C_0 \qquad f_n(x,t) = C_k \cos(\lambda_n x) e^{-D\lambda_n^2 t}$$

und die Lösung lässt sich darstellen als

$$c(x,t) = C_0 + \sum_n C_n \cos(\lambda_n x) e^{-D\lambda_n^2 t}.$$

Die Koeffizienten ergeben sich zu

$$LC_0 = \int_0^L c(x,0) dx = M$$

und

$$\frac{L}{2}C_n = \int_0^L \cos(\lambda_n x)c(x,0)dx = \begin{cases} (-1)^k \frac{2M}{(2k+1)\pi} & n = 2k+1 \\ 0 & n = 2k \end{cases}$$

Im Folgenden verwenden wir die Abkürzung $\lambda_k = (2k+1)\frac{\pi}{L}$. Für die Anzahl an Teilchen im ersten Volumen folgt:

$$\begin{aligned} M_1(t) = \int_0^{\frac{L}{2}} c(x,t) &= \frac{M}{2} + \sum_k C_k e^{-D\lambda_k^2 t} \int_0^{\frac{L}{2}} \cos(\lambda_k x)dx \\ &= \frac{M}{2} + \sum_k (-1)^k \frac{4M}{(2k+1)\pi L} e^{-D\lambda_k^2 t} (-1)^k \frac{L}{(2k+1)\pi} \\ &= \frac{M}{2} + \sum_k \frac{4M}{(2k+1)^2\pi^2} e^{-D\lambda_k^2 t}. \end{aligned}$$

Und dessen Änderung

$$\dot{M}_1(t) = -4MD \sum_k \frac{4M\lambda_k^2}{(2k+1)^2\pi^2} e^{-D\lambda_k^2 t} = -\frac{4MD}{L^2} \sum_k e^{-D\lambda_k^2 t}$$