Technische Universität Berlin
Institut für Theoretische Physik
PD Dr. S. H. L. Klapp,
Sebastian Heidenreich

9. November 2007

4. Übungsblatt zur Statistische Physik II

Abgabe (Einzelabgabe): Eine Woche nach der Ausgabe im Tutorium.

Aufgabe 1 : *Virialentwicklung, Brillouin-Funktion (10 Punkte)*
Im Gegensatz zu idealen Fluiden zeichnen sich reale Fluide durch eine Wechselwirkung der Partikel untereinander aus. Nimmmt man an, dass außer der Zweiteilchenwechselwirkung Mehrteilchenwechselwirkungen vernachlässigbar sind, dann wird ein klassisches System durch

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j} \phi_{ij},$$

beschrieben, wobei mit $\phi_{ij} = \phi(|\mathbf{r_i} - \mathbf{r_j}|)$ das Zweiteilchenpotential bezeichnet wurde. Die thermische Zustandsgleichung des obigen Systems unterscheidet sich von der idealen Zustandsgleichung. Die Abweichung in der Ordnung (V/N) wird durch die Virialentwicklung angegeben

$$\frac{p}{kT} = \frac{N}{V}(1 + B_2(T)\frac{N}{V} + B_3(T)\left(\frac{N}{V}\right)^2 + ...),$$

wobei $B_2(T), B_3(T)$... zweiter, dritter,...Virialkoeffizient heißt. Der zweite Virialkoeffizient entspricht dem Integral

$$B_2(T) = -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d^3r f(r)$$

über die Mayer Funktion

$$f(r) = e^{-\beta\phi(r)} - 1.$$

a) Betrachten Sie nun das folgende molekulare Potenzial

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & 0 \le r \le r_0 \\ -\epsilon & r_0 < r \le r_1 \\ 0 & r_1 < r < \infty. \end{cases}$$

Stellen Sie das Potenzial graphisch dar (mit Mathematica) und bestimmen Sie den zweiten Virialkoeffizienten $B_2(T)$ analytisch.
b) Die Van der Waals-Gleichung

$$\left[p + \left(\frac{N}{V}\right)^2 a\right]\left(\frac{V}{N} - b\right) = kT$$

beschreibt die Modifikation der idealen Gasgleichung für reale Gase in Abhängigkeit von den Parametern a, b.
Wie hängen die Parameter a, b der Van der Waals-Gleichung mit den Parametern des molekularen Potenzials zusammen?
Hinweis: Verwenden Sie die Näherung $\frac{1}{1-bn} \approx 1 + bn + b^2n^2 + ...$.
c) Betrachten Sie das Potential

$$\phi(r) = \begin{cases} u_0 & 0 \le r \le r_0 \\ -\epsilon\left(\frac{r_0}{r}\right)^6 & r_0 < r \le \infty. \end{cases}$$

Berechnen Sie den zweiten Virialkoeffizienten analytisch und numerisch (z.B. mit Mathematica) und untersuchen Sie $B_2(T)$ für große Temperaturen, dh. $\beta\epsilon \ll 1$ und $1 \ll \beta u_0$. Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse.
Hinweis: Verwenden Sie $\int dr \sum_{k=1}^{\infty} = \sum_{k=1}^{\infty} \int dr$.

Bitte wenden →

d) Ein in der Anwendung sehr häufig auftretendes Potential ist das Lenard-Jones-Potential

$$\phi(r) = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right).$$

Die analytische Berechnung des zweiten Virialkoeffizienten für das Lenard-Jones-Potential ist schwierig und führt auf

$$B_2(T^*) = -\frac{2\pi}{3}\sigma^3 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^{j-\frac{3}{2}}}{j!}\Gamma\left(\frac{2j-1}{4}\right)T^{*-(2j+1)/4},$$

wobei $T^* = \frac{kT}{\epsilon}$ die reduzierte Temperatur ist.
Stellen Sie das Lenard-Jones-Potential graphisch dar. Berechnen Sie den zweiten Virialkoeffizienten numerisch und stellen Sie B_2 als Funktion von T dar (z.B. Mathematica). Vergleichen Sie ihr Ergebnis mit dem analytischen Ausdruck.
Hinweis: Sie können für den Vergleich die reduzierten Größen $T^* = \frac{kT}{\epsilon}$ und $r^* = \frac{r}{\sigma}$ verwenden (in der obigen Formel ist dann $\sigma = 1$).

e) In der Vorlesung wurde im Rahmen einer 'Mean fild' Näherung die Brillouin-Funktion zur Beschreibung eines idealen Paramagneten hergeleitet. Stellen Sie die Brillouin-Funktion für $J = 1/2, 1, 3/2, 4, 5/2, 5, 20$ und die Langevin-Funktion in einem Diagramm mit dar (Mathematica). Bestimmen Sie durch numerische Integration den Abstand $d(f,g) := ||f-g||_2$ der Brillouin-Funtion zur Langevin-Funktion für die verschiedenen oben angegebenen Werte von J. Für welches J ist der Abstand kleiner als 0.1?
Hinweis:
Hier bezeichnet $||\cdot||_2$ die $L2$ Norm.

- Vorlesung: Mi 10^{15} - 11^{45} Uhr, EW 731 Do 14^{15} - 15^{45} Uhr, EW 184
  Tutorien: Mo 14^{15} - 15^{45} Uhr, EW 184
- **Kontakt, Inhalte, Übungsblätter etc.:** http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ws0708/wpfv/statii/
- **Scheinkriterien:**
  Mindestens 50 Prozent der Übungspunkte und aktive Teilnahme am Tutorium.
  Mit diesem Übungsschein sind die Übungen im Fach Statistische Physik I und II abgegolten.
- **Sprechstunde:** S. Heidenreich im EW 702, jeder Zeit