Übungen zur Computational Physics

Aufgabe 9 — Unfairer Würfel
Gegeben sei ein (unfairer) "Würfel" mit $M + 1$ Seiten $k = 0, 1, 2, ..., M$. Die Seite k habe $X_k = k$ Augen. Die einzelnen Wahrscheinlichkeiten p_k für $k = 0, 1, 2, ..., M$ sind unbekannt. Sicher ist aber die mittlere Augenzahl $\langle X \rangle = X_0$, die durch einen Wert $X_0 > 0$ vorgegeben ist.

a) Zeigen Sie mit Hilfe des Prinzips der Maximierung der Shannon-Information, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung von der Form $p_k = e^{-\lambda x_k}/Z(\lambda)$ ist.

b) Beweisen Sie, dass $\langle X \rangle = -(\partial/\partial\lambda) \ln Z(\lambda)$!

c) Beweisen Sie, dass $\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = (\partial^2/\partial\lambda^2) \ln Z(\lambda)$

d) Berechnen Sie explizit die Funktion $Z(\lambda)$ für $M \to \infty$!

e) Bestimmen Sie λ als Funktion von $X_0 = \langle X \rangle$ im Fall $M \to \infty$!

Aufgabe 10 — Fluktuationen
Der Makrozustand eines klassischen Systems im thermodynamischen Gleichgewicht wird durch die Wahrscheinlichkeiten

$$p_k = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_k}$$

beschrieben, mit der die Mikrozustände $k = 1, ..., M$ vorliegen. E_k sei die Energie des Mikrozustands k.

a) Geben Sie die Zustandssumme Z an!

b) Wie berechnet sich der Erwartungswert der Energie $E = \langle E \rangle$?

c) Berechnen Sie jetzt die Wärmekapazität

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} \ ,$$

und zeigen Sie, dass sich die Energiefluktuationen folgendermaßen durch C ausdrücken lassen:

$$\Delta E = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = k_B T^2 \ !$$