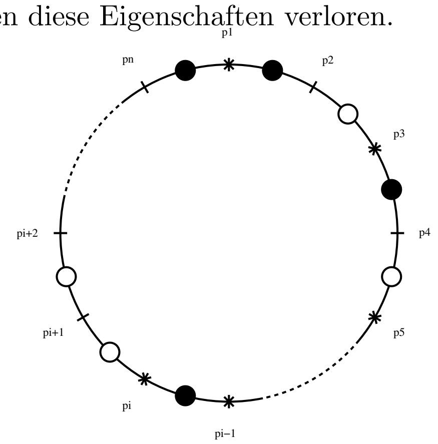
Übung 1. *Der Kac'sche Ring, Teil I*

Das folgende Beispiel eines einfachen dynamischen Systems mit diskreter Zeitentwicklung soll die Rolle des Stosszahlansatzes in der Boltzmann-Gleichung illustrieren. Die zunächst deterministische Dynamik des Systems ist zeitumkehrinvariant und hat die Wiederkehreigenschaft. Wird sie aber durch eine statistische Annahme vereinfacht, so gehen diese Eigenschaften verloren.

Auf einem Kreis seien n Punkte P_i angebracht, wovon m markiert sind (letztere sind in der Figur mit "$*$" gekennzeichnet). Zwischen je zwei Punkten P_i, P_{i+1} befindet sich eine Perle, die entweder weiss oder schwarz ist. Nach jedem Zeitschritt bewegen sich alle Perlen einen Schritt im Uhrzeigersinn. Diejenigen Perlen, die dabei einen markierten Punkt passieren, wechseln ihre Farbe. Es sei $N_b(t)$ ($N_w(t)$) die Zahl der schwarzen (weissen) Perlen zur Zeit t, ferner $n_b(t)$ ($n_w(t)$) die Zahl der schwarzen (weissen) Perlen, vor denen sich ein markierter Punkt befindet.



(a) Finde die Bewegungsgleichungen für diese Grössen.

(b) Leite die "Boltzmann-Gleichung" her durch Einführung eines Analogons des Stosszahlansatzes, d.h. mache die Annahme, dass die Farbe einer Perle mit der Eigenschaft, einen markierten Punkt vor sich zu haben, nicht korreliert sei.

(c) Löse die Gleichung für den Fall $0 < m < n$.

Lösung. (a) Die Bewegungsgleichungen lauten

$$N_w(t+1) = N_w(t) + n_b(t) - n_w(t) \ ,$$
$$N_b(t+1) = N_b(t) + n_w(t) - n_b(t) \ .$$

(b) Die statistische Annahme ist

$$n_w(t) = \frac{m}{n} N_w(t) \ , \qquad n_b(t) = \frac{m}{n} N_b(t) \ ,$$

und man bekommt

$$N_w(t+1) = N_b(t)\frac{m}{n} + N_w(t)\Big(1 - \frac{m}{n}\Big) \ ,$$
$$N_b(t+1) = N_w(t)\frac{m}{n} + N_b(t)\Big(1 - \frac{m}{n}\Big) \ .$$

(c) Wir lösen diese Gleichungen durch Bildung der Summe und der Differenz:

$$N_b(t+1) + N_w(t+1) = N_b(t) + N_w(t) \ ,$$
$$N_b(t+1) - N_w(t+1) = \Big(1 - \frac{2m}{n}\Big)\big(N_b(t) - N_w(t)\big) \ ,$$

also:

$$N_b(t) + N_w(t) = N_b(0) + N_w(0) = n \ ,$$
$$N_b(t) - N_w(t) = \Big(1 - \frac{2m}{n}\Big)^t \big(N_b(0) - N_w(0)\big) \ .$$

Insbesondere gilt für $0 < m < n$

$$\Big(1 - \frac{2m}{n}\Big)^t \longrightarrow 0 \qquad \text{für } t \to \infty \ ;$$

damit ist $N_b(t)$, $N_w(t) \xrightarrow{t\to\infty} n/2$.

Übung 2. ***Der Kac'sche Ring, Teil II***

Betrachte nochmals das Modell in der Übung 1. Diesmal soll gezeigt werden, dass sich das Gleichgewicht auch bei deterministischer Zeitentwicklung (kein Stosszahlansatz!) einstellt im Limes eines grossen Systems. Sei

$$\epsilon_i = \begin{cases} +1\,, & \text{falls der Punkt } P_i \text{ nicht markiert ist,} \\ -1\,, & \text{falls der Punkt } P_i \text{ markiert ist} \end{cases}$$

und

$$\eta_i(t) = \begin{cases} +1\,, & \text{wenn die Perle zwischen } P_{i-1} \text{ und } P_i \text{ zur Zeit } t \text{ schwarz ist,} \\ -1\,, & \text{wenn die Perle zwischen } P_{i-1} \text{ und } P_i \text{ zur Zeit } t \text{ weiss ist.} \end{cases}$$

(a) Drücke $N_b(t) - N_w(t)$ als Funktion $f(\epsilon_i, \eta_i(0))$ aus.

Die markierten Punkte stehen zur gesamten Anzahl im Verhältnis $\mu = m/n$. Statt einer bestimmten Konfiguration der Markierungen betrachte eine Wahrscheinlichkeitsverteilung: Jeder Punkt habe unabhängig von allen anderen die Wahrscheinlichkeit μ, markiert zu sein. In den allermeisten Fällen gelangen die Perlen für grosses n ins Gleichgewicht. Einfachheitshalber soll dies im Mittel gezeigt werden:

(b) Was ist die Wahrscheinlichkeit, dass eine Perle in der Zeit t genau s markierte Punkte passiert? Berechne daraus den Mittelwert $\langle N_b(t) - N_w(t)\rangle$ über alle Konfigurationen der markierten Punkte bei festem μ für $t \le n$, sowie dessen Grenzwert für n, $m \to \infty$. Was passiert beim nachfolgenden Limes $t \to \infty$?

Lösung. (a) Es gilt $\eta_i(t) = \epsilon_{i-1}\eta_{i-1}(t-1)$, und induktiv folgt daraus, dass

$$\eta_i(t) = \Big(\prod_{k=i-t}^{i-1} \epsilon_k\Big)\eta_{i-t}(0) =: \mathcal{E}_i(t)\,\eta_{i-t}(0)\,.$$

Nach Definition von η_i ist $N_b(t) - N_w(t) = \sum_{i=1}^n \eta_i(t)$; zusammen also

$$N_b(t) - N_w(t) = \sum_{i=1}^n \mathcal{E}_i(t)\,\eta_{i-t}(0)\,. \tag{L.1}$$

(b) Solange $t \le n$, sind die t Faktoren $\epsilon_{i-1}, \dots, \epsilon_{i-t}$ unabhängige Zufallsvariablen, denn sie gehören zu verschiedenen Punkten. Damit ist

$$\langle \mathcal{E}_i(t)\rangle = \prod_{k=i-t}^{i-1} \langle \epsilon_k\rangle\,, \qquad \langle \epsilon_k\rangle = \mu\cdot(-1) + (1-\mu)\cdot 1 = 1 - 2\mu\,,$$

also

$$\langle \mathcal{E}_i(t)\rangle = (1-2\mu)^t\,,$$

unabhängig von i, und so ist mit (L.1)

$$\langle N_b(t) - N_w(t)\rangle = (1-2\mu)^t \sum_{i=1}^n \eta_{i-t}(0) = (1-2\mu)^t [N_b(0) - N_w(0)]\,, \qquad (t \le n)\,.$$

Nun kann man den Limes berechnen

$$\lim_{\substack{n\to\infty \\ \mu \text{ fest}}} \langle N_b(t) - N_w(t)\rangle = \lim_{\substack{n\to\infty \\ \mu \text{ fest}}} (1-2\mu)^t [N_b(0) - N_w(0)] = (1-2\mu)^t [N_b(0) - N_w(0)]\,,$$

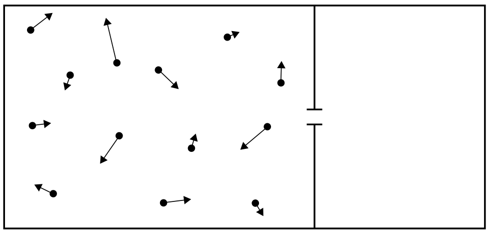
da der Fall $t \le n$ genügt, um ihn zu vollziehen. Schliesslich ergibt sich

$$\lim_{t\to\infty} \lim_{\substack{n\to\infty \\ \mu \text{ fest}}} \langle N_b(t) - N_w(t)\rangle = 0 \qquad \text{für } 0 < \mu < 1\,,$$

das heisst, Gleichgewicht zwischen schwarz und weiss stellt sich ein.

Übung 3. *Effusion*

Ein Gas im Behälter 1 (Temperatur T, Druck p), bestehend aus Molekülen der Masse m, strömt in den (anfangs leeren) Behälter 2 durch ein kleines Loch (Abmessungen klein gegenüber der mittleren freien Weglänge). Das Gas im Behälter 1 wird durch die Maxwell-Boltzmann Verteilung



$$f(\vec{v}) = n\left(\frac{m}{2\pi k_\mathrm{B}T}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\frac{m\vec{v}^2}{2k_\mathrm{B}T}} \tag{1}$$

beschrieben (siehe Gleichung 4.31 im Skript). Die Wände seien wärmeundurchlässig.

(a) Berechne den Teilchenstrom pro Flächeneinheit. (*Antwort:* $j = \frac{p}{\sqrt{2\pi mkT}}$)

(b) Das Loch bleibe nur während kurzer Zeit offen, sodass sich die Verteilung der Teilchen im Behälter 1 nicht ändert. Danach kommt das Gas im Behälter 2 ins Gleichgewicht. Zeige, dass seine Temperatur gegeben ist durch $T_2 = (4/3)T$.
Erkläre den gefundenen Temperaturunterschied.

Lösung.

(a) Der Teilchenstrom $\mathrm{d}I$ pro Fläche $\mathrm{d}o$ ist die Stromdichte j, d.h. $\mathrm{d}I = j\mathrm{d}o$. Besteht dieser aus Teilchen der Geschwindigkeit v (senkrecht zu $\mathrm{d}o$) und der Dichte ρ, so ist $j = \rho v$, denn $\mathrm{d}I\mathrm{d}t = \rho \cdot (v\mathrm{d}t) \cdot \mathrm{d}o$ ist die Teilchenzahl, die in $\mathrm{d}t$ durch $\mathrm{d}o$ fliesst.
Wähle die 1-Achse senkrecht zum Loch. Der Beitrag zur Dichte n seitens der Teilchen mit Geschwindigkeit $\vec{v} \in \mathrm{d}^3v$ ist durch die Maxwell-Boltzmann Verteilung

$$f(\vec{v})\mathrm{d}^3v = n\left(\frac{m}{2\pi k_\mathrm{B}T}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\frac{m\vec{v}^2}{2k_\mathrm{B}T}}\,\mathrm{d}^3v\ , \tag{L.2}$$

gegeben. Ihr Beitrag zur Stromdichte ist $v_1 f(\vec{v})\mathrm{d}^3v$, insgesamt also $j = \int_{v_1>0} v_1 f(\vec{v})\,\mathrm{d}^3v$. Hier geht die Annahme über die mittlere freie Weglänge ein, wonach die Teilchen im Loch, die nach rechts laufen, die Gleichgewichtsverteilung des Behälters 1 haben, und Behälter 2 leer ist. Die Berechnung des Integrals ist

$$j = n\left(\frac{m}{2\pi k_\mathrm{B}T}\right)^{1/2} \int_0^\infty v_1 e^{-\frac{mv_1^2}{2k_\mathrm{B}T}}\,\mathrm{d}v_1 \tag{L.3}$$

$$= n\left(\frac{m}{2\pi k_\mathrm{B}T}\right)^{1/2} \frac{2k_\mathrm{B}T}{m} \cdot \int_0^\infty x\mathrm{e}^{-x^2}\,\mathrm{d}x \tag{L.4}$$

$$= n\sqrt{\frac{k_\mathrm{B}T}{2\pi m}} = \frac{p}{\sqrt{2\pi m k_\mathrm{B}T}} \tag{L.5}$$

unter Verwendung $\int_0^\infty x\mathrm{e}^{-x^2}\,\mathrm{d}x = 1/2$. Im letzten Schritt wurde das ideale Gasgesetz $p = nk_\mathrm{B}T$ benutzt.

(b) Da das Loch nur kurz offen ist, ändert sich die Verteilung der Teilchen im Behälter 1 kaum. Der Energiestrom von Teilchen mit Geschwindigkeit $\vec{v}$ ist gegeben als Produkt von Energiedichte $nm\vec{v}^2/2$ mit der Geschwindigkeit v_1 senkrecht zur Öffnung. Der gesamte Energiestrom ist dann

$$e = \int_{v_1>0} v_1 \cdot \frac{m}{2}\left(v_1^2 + v_2^2 + v_3^2\right) f(\vec{v})\,\mathrm{d}^3v\ . \tag{L.6}$$

Der Einfachheit halber definieren wir erneut $a = n\left(\frac{m}{2\pi k_\mathrm{B}T}\right)^{3/2}$ und $c = \sqrt{\frac{2k_\mathrm{B}T}{m}}$. Die mittlere Energie eines durchströmenden Teilchens ist damit

$$\bar{E} = \frac{e}{j} = \frac{\int_{v_1>0} v_1 \cdot \frac{m}{2}\left(v_1^2+v_2^2+v_3^2\right) a \exp\left(\frac{1}{c^2}(v_1^2+v_2^2+v_3^2)\right)\, \mathrm{d}^3v}{\int_{v_1>0} v_1 a \exp\left(\frac{1}{c^2}(v_1^2+v_2^2+v_3^2)\right)\, \mathrm{d}^3v} \tag{L.7}$$

$$= \frac{m}{2} \cdot \left(\frac{\int_0^\infty v_1^3 \exp(v_1^2/c^2)\mathrm{d}v_1}{\int_0^\infty v_1 \exp(v_1^2/c^2)\mathrm{d}v_1} + 2\frac{\int_{-\infty}^\infty v_2^2 \exp(v_2^2/c^2)\mathrm{d}v_2}{\int_{-\infty}^\infty \exp(v_2^2/c^2)\mathrm{d}v_2}\right) \tag{L.8}$$

$$= \frac{m}{2}\, c^2 \cdot \left(\frac{\int_0^\infty x^3 \mathrm{e}^{-x^2}\, \mathrm{d}x}{\int_0^\infty x\mathrm{e}^{-x^2}\, \mathrm{d}x} + 2\frac{\int_{-\infty}^\infty x^2\mathrm{e}^{-x^2}\, \mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^\infty \mathrm{e}^{-x^2}\, \mathrm{d}x}\right) \tag{L.9}$$

$$= k_\mathrm{B}T\left(\frac{1/2}{1/2} + 2\,\frac{\sqrt{\pi}/2}{\sqrt{\pi}}\right) = 2k_\mathrm{B}T\ . \tag{L.10}$$

Die Rückkehr ins Gleichgewicht erfolgt nach Annahme bei konstantem $\bar{E}$; die entsprechende Temperatur T_2 ergibt sich aus $\bar{E} = (3/2)k_\mathrm{B}T_2$. Also: $T_2 = (4/3)T$.

Höherenergetische Teilchen machen einen grösseren Teil des Stromes aus, da sie sich mit einer höheren Geschwindigkeit bewegen. Entsprechend ist die mittlere Energie eines Teilchens, also die Temperatur im Behälter 2 höher als in Behälter 1.