Theo-II: Analytische Mechanik und Thermodynamik (PTP2)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2020

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Christian Angrick

Übungsblatt 7

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen am 15. Juni 2020
Bitte schicken Sie maximal 2 Aufgaben per E-Mail zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!

1. Kugelvolumen im n-dimensionalen Raum

Wie Sie in der Vorlesung gesehen haben, tritt bei der Bestimmung der Anzahl möglicher Mikrozustände bei vorgegebener Energie die Frage auf, wie groß das Volumen einer Kugel mit Radius r im n-dimensionalen Raum ist. Letztere ist durch die Menge

$$S_r^n = \left\{ x \in \mathbb{R}^n \,\middle|\, \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \leq r^2 \right\}$$

definiert.

a) Zeigen Sie, dass das Volumen einer solchen Kugel durch

$$V_n = \frac{\Omega_n r^n}{n}$$

gegeben ist, wobei Ω_n der n-dimensionale Raumwinkel ist. Benutzen Sie dabei, dass das Volumenelement in n Dimensionen durch $\mathrm{d}V_n = r^{n-1}\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\Omega_n$ gegeben ist.

b) Zeigen Sie, dass die folgenden Gleichheiten gelten,

$$\Omega_n \int_0^\infty \mathrm{d}r\ \mathrm{e}^{-r^2}\, r^{n-1} = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2}\,\mathrm{d}x \right)^n = \pi^{n/2}.$$

c) Führen Sie das Integral auf der linken Seite der vorherigen Gleichung durch geeigente Substitution zurück auf die *Gammafunktion*

$$\Gamma(x) \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^{x-1}\, \mathrm{e}^{-t}\,.$$

d) Folgern Sie aus den Ergebnissen der Teilaufgaben a) bis c) zusammen mit der Identität $x\,\Gamma(x) \equiv \Gamma(x+1)$, dass das Volumen der n-dimensionalen Kugel durch

$$V_n = \frac{\pi^{n/2} r^n}{\Gamma(n/2+1)} \tag{I}$$

gegeben ist.

e) Nutzen Sie die Eigenschaften der Gammafunktion

$$\Gamma(n+1) = n! \qquad \text{und} \qquad \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{n!\,4^n}\sqrt{\pi}$$

mit $n \in \mathbb{N}$, um zu zeigen, dass (I) die Volumina $V_2 = \pi r^2$ und $V_3 = 4\pi r^3/3$ reproduziert.

2. *Anzahl von Mikrozuständen*

Betrachten Sie ein System aus $N \gg 1$ Punktteilchen der Masse m mit der zugehörigen Hamilton-Funktion

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} z_i^2 + V(x_i, y_i) \right] \qquad \text{mit} \qquad V(x_i, y_i) = \begin{cases} 0 & \text{für } x_i^2 + y_i^2 \leq R^2 \\ \infty & \text{für } x_i^2 + y_i^2 > R^2. \end{cases}$$

Die Teilchen spüren also ein harmonisches Potential parallel zur z-Achse, während sie sich orthogonal dazu nur innerhalb des Radius R bewegen können.

a) Berechnen Sie die zugänglichen Zustände bis zur Maximalenergie E,

$$\Phi(E) = \frac{1}{h_0^{3N}} \int\limits_{0 \leq H \leq E} \prod_{i=1}^{N} \mathrm{d}x_i \, \mathrm{d}y_i \, \mathrm{d}z_i \, \mathrm{d}p_{x,i} \, \mathrm{d}p_{y,i} \, \mathrm{d}p_{z,i}, \tag{II}$$

indem Sie

(i) für x_i und y_i der Symmetrie angemessene Koordinaten einführen,

(ii) neue Koordinaten für z_i, $p_{x,i}$, $p_{y,i}$ und $p_{z,i}$ einführen, sodass $\bar{H} \equiv H - \sum_{i=1}^{N} V(x_i, y_i)$ als $\bar{H} = \sum_{j=1}^{4N} \xi_j^2$ geschrieben werden kann,

(iii) die Integration (II) in den neuen Koordinaten ausführen und dabei einen Teil auf das Volumenintegral einer $4N$-dimensionalen Kugel vom Radius $\sqrt{E}$ zurückführen. Benutzen Sie dazu, dass das Volumen einer n-dimensionalen Kugel durch (I) gegeben ist.

b) Berechnen Sie die Anzahl der Zustände $\Omega(E)$ in der Energieschale $E \leq H \leq E + \delta E$.

3. *Vollständige und unvollständige Differentiale*

Die folgenden Differentiale beschreiben näherungsweise das Verhalten realer Gase als Funktion des Drucks P, des Volumens V und der Temperatur T. Prüfen Sie, ob es sich bei

a) $\delta F(P, V, T) = (V - b)\, \mathrm{d}P + \left(P - \frac{a}{V^2} + \frac{2ab}{V^3} \right) \mathrm{d}V - R\, \mathrm{d}T,$

b) $\delta F(P, V, T) = V\, \mathrm{d}P + \left(P - \frac{a}{V^2} \right) \mathrm{d}V - \left(\frac{cP}{T^2} + R \right) \mathrm{d}T,$

um vollständige Differentiale handelt; a, b, c und R seien hierbei Konstanten. Bestimmen Sie, wenn möglich, die zugehörige Funktion F.

4. *Verständnisfragen*

a) Wodurch ist ein Mikrozustand in einem System aus klassisch-mechanischen Teilchen gekennzeichnet?

b) Wodurch kann dagegen ein Makrozustand angegeben werden?

c) Was besagt das Grundpostulat der statistischen Physik?

Theo-II: Analytische Mechanik und Thermodynamik (PTP2)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2020

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Christian Angrick

Übungsblatt 7: Lösungen

1. Kugelvolumen im n-dimensionalen Raum

a) Das Volumen kann in n-dimensionalen Kugelkoordinaten als

$$V_n = \int_{S_r^n} \mathrm{d}V_n = \int_0^r \mathrm{d}r'\, r'^{n-1} \int \mathrm{d}\Omega_n = \frac{r^n}{n}\Omega_n \tag{I}$$

berechnet werden.

b) Man schreibt das erste Integral komplett wie bei a) in n-dimensionalen Kugelkoordinaten und formt es dann in n-dimensionale kartesische Koordinaten um, um die erste Gleichheit zu zeigen,

$$\begin{aligned}\Omega_n \int_0^\infty \mathrm{d}r\ \mathrm{e}^{-r^2}\, r^{n-1} &= \int \mathrm{d}\Omega_n \int_0^\infty \mathrm{d}r\ \mathrm{e}^{-r^2}\, r^{n-1} = \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}x_1 \ldots \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}x_n\ \mathrm{e}^{-\left(x_1^2+\ldots+x_n^2\right)} \\ &= \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}x_1\ \mathrm{e}^{-x_1^2} \ldots \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}x_n\ \mathrm{e}^{-x_n^2} = \left(\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-x^2}\right)^n .\end{aligned}$$

Die zweite Gleichheit kann gezeigt werden, indem ausgenutzt wird, dass das Integral in Polarkoordinaten geschrieben und berechnet werden kann,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{-x^2} &= \sqrt{\int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}x \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}y\ \mathrm{e}^{-\left(x^2+y^2\right)}} = \sqrt{2\pi \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r\, \mathrm{e}^{-r^2}} = \sqrt{\pi}\,\sqrt{\int_\infty^0 \mathrm{d}r\,(-2r)\,\mathrm{e}^{-r^2}} \\ &= \sqrt{\pi}\,\sqrt{\left.\mathrm{e}^{-r^2}\right|_{r=\infty}^{0}} = \sqrt{\pi}.\end{aligned}$$

c) Substituiere $t = r^2$, sodass

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}r} = 2r = 2\sqrt{t} \qquad \Rightarrow \qquad \mathrm{d}r = \frac{\mathrm{d}t}{2\sqrt{t}}$$

gilt. Damit kann die Umformung beginnen,

$$\Omega_n \int_0^\infty \mathrm{d}r\ \mathrm{e}^{-r^2}\, r^{n-1} = \Omega_n \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}t}{2\sqrt{t}}\ \mathrm{e}^{-t}\, t^{(n-1)/2} = \frac{\Omega_n}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-t}\, t^{n/2-1} = \frac{\Omega_n}{2}\,\Gamma\!\left(\frac{n}{2}\right).$$

d) Gleichzeitig ist aus b) bekannt, dass der vorherige Ausdruck gleich $\pi^{n/2}$ ist, sodass

$$\frac{\Omega_n}{2}\,\Gamma\!\left(\frac{n}{2}\right) = \pi^{n/2} \qquad \Rightarrow \qquad \Omega_n = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}$$

gilt. Eingesetzt in (I) ergibt dies

$$V_n = \frac{2\pi^{n/2} r^n}{n\,\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} = \frac{\pi^{n/2} r^n}{\frac{n}{2}\,\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} = \frac{\pi^{n/2} r^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)}. \tag{II}$$

e) Für $n = 2$ ist $\Gamma(n/2+1) = \Gamma(2) = 1! = 1$ und somit $V_2 = \pi r^2$.

Für $n = 3$ ist

$$\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right) = \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \Gamma\left(2+\frac{1}{2}\right) = \frac{4!}{2!\,4^2}\sqrt{\pi} = \frac{12}{16}\sqrt{\pi} = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}$$

und somit

$$V_3 = \frac{\pi^{3/2} r^3}{\frac{3}{4}\sqrt{\pi}} = \frac{4\pi}{3} r^3.$$

2. *Anzahl von Mikrozuständen*

a) Das Potential $V(x_i, y_i)$ schränkt die Bewegung der Teilchen orthogonal zur z-Achse auf die Fläche eines Kreises mit Radius R ein, hat aber ansonsten keine Auswirkungen auf die Gesamtenergie. Es ist also sinnvoll, das Flächenelement $\mathrm{d}x_i\,\mathrm{d}y_i$ in Polarkoordinaten auszudrücken,

$$\mathrm{d}x_i\,\mathrm{d}y_i = r_i\,\mathrm{d}r_i\,\mathrm{d}\varphi_i.$$

Damit lässt das Phasenraumvolumen $\Phi(E)$ zu

$$\Phi(E) = \frac{1}{h_0^{3N}}\left(\prod_{i=1}^{N}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi_i\int_0^R \mathrm{d}r_i\,r_i\right)\left(\int\limits_{0\le\bar{H}\le E}\prod_{i=1}^{N}\mathrm{d}z_i\,\mathrm{d}p_{x,i}\,\mathrm{d}p_{y,i}\,\mathrm{d}p_{z,i}\right)$$

mit

$$\bar{H} \equiv \sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}z_i^2$$

umschreiben. Das Integral über die Winkelvariablen φ_i sowie über die Radialvariablen r_i lässt sich trivial ausführen, da für alle dieselben Integrationsgrenzen gelten. Es gilt daher

$$\prod_{i=1}^{N}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi_i\int_0^R\mathrm{d}r_i\,r_i = \left(\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^R\mathrm{d}r\,r\right)^N = \left(\pi R^2\right)^N,$$

sodass $\Phi(E)$ durch

$$\Phi(E) = \left(\frac{\pi R^2}{h_0^3}\right)^N \int\limits_{0\le\bar{H}\le E}\prod_{i=1}^{N}\mathrm{d}z_i\,\mathrm{d}p_{x,i}\,\mathrm{d}p_{y,i}\,\mathrm{d}p_{z,i}$$

gegeben ist. Um das verbleibende Integral zu berechnen, führt man neue Variablen ein,

$$\begin{aligned}
\xi_i &= \frac{p_{x,i}}{\sqrt{2m}} &&\Rightarrow && \mathrm{d}p_{x,i} = \sqrt{2m}\,\mathrm{d}\xi_i,\\
\xi_{i+N} &= \frac{p_{y,i}}{\sqrt{2m}} &&\Rightarrow && \mathrm{d}p_{y,i} = \sqrt{2m}\,\mathrm{d}\xi_{i+N},\\
\xi_{i+2N} &= \frac{p_{z,i}}{\sqrt{2m}} &&\Rightarrow && \mathrm{d}p_{z,i} = \sqrt{2m}\,\mathrm{d}\xi_{i+2N},\\
\xi_{i+3N} &= \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}\,z_i &&\Rightarrow && \mathrm{d}z_i = \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}}\,\mathrm{d}\xi_{i+3N},
\end{aligned}$$

wobei jeweils $1 \le i \le N$ gilt. In den neuen Variablen erhält man

$$\bar{H} = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{p_{x,i}^2 + p_{y,i}^2 + p_{z,i}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}z_i^2\right) = \sum_{j=1}^{4N}\xi_j^2,$$

sodass $\Phi(E)$ nun durch

$$\Phi(E) = \left(\frac{\pi R^2}{h_0^3}\right)^N \left(\frac{4m}{\omega}\right)^N \int\limits_{0\leq \tilde{H}\leq E} \prod_{j=1}^{4N} \mathrm{d}\xi_j = \left(\frac{4\pi m R^2}{h_0^3 \omega}\right)^N \Omega_{4N} \int_0^{\sqrt{E}} \mathrm{d}r\, r^{4N-1}$$

gegeben ist. Der zweite Teil der Berechnung von $\Phi(E)$ lässt sich somit auf ein Volumenintegral einer $4N$-dimensionalen Kugel mit Radius $\sqrt{E}$ zurückführen, wobei Ω_{4N} der $4N$-dimensionale Raumwinkel ist. Das Volumen einer n-dimensionalen Kugel mit Radius r ist dabei durch (II) gegeben. Damit erhält man für $\Phi(E)$ das Ergebnis

$$\Phi(E) = \left(\frac{4\pi R^2 m}{h_0^3 \omega}\right)^N \frac{\pi^{4N/2} E^{4N/2}}{\Gamma\left(\frac{4N}{2}+1\right)} = \left(\frac{4\pi^3 R^2 m}{h_0^3 \omega}\right)^N \frac{E^{2N}}{(2N)!}.$$

b) Die Anzahl der Zustände $\Omega(E)$ in der Energieschale $E \leq H \leq E + \delta E$ lässt sich aus dem Phasenraumvolumen $\Phi(E)$ durch

$$\Omega(E) = \Phi(E + \delta E) - \Phi(E) = \frac{\partial \Phi(E)}{\partial E}\, \delta E$$

bestimmen. Damit ergibt sich

$$\Omega(E) = \left(\frac{4\pi^3 R^2 m}{h_0^3 \omega}\right)^N \frac{2N E^{2N-1}}{(2N)!}\, \delta E = \left(\frac{4\pi^3 R^2 m}{h_0^3 \omega}\right)^N \frac{E^{2N-1}}{(2N-1)!}\, \delta E.$$

3. Vollständige und unvollständige Differentiale

Ist δF ein vollständiges Differential, dann gilt

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial P}\,\mathrm{d}P + \frac{\partial F}{\partial V}\,\mathrm{d}V + \frac{\partial F}{\partial T}\,\mathrm{d}T.$$

Man benutzt im Folgenden, dass es bei den zweiten Ableitungen dann nicht auf die Reihenfolge der Ableitungen ankommt, sodass z.B.

$$\frac{\partial^2 F}{\partial P\, \partial V} = \frac{\partial^2 F}{\partial V\, \partial P}$$

ist. Ist Letzteres nicht erfüllt, kann es sich bei δF nicht um ein vollständiges Differential handeln.

a) Betrachte den Ausdruck

$$\delta F(P, V, T) = (V - b)\,\mathrm{d}P + \left(P - \frac{a}{V^2} + \frac{2ab}{V^3}\right)\mathrm{d}V - R\,\mathrm{d}T.$$

Die ersten und zweiten Ableitungen sind dann durch

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial P} &= V - b & &\Rightarrow & \frac{\partial^2 F}{\partial V\, \partial P} &= 1, & \frac{\partial^2 F}{\partial T\, \partial P} &= 0,\\
\frac{\partial F}{\partial V} &= P - \frac{a}{V^2} + \frac{2ab}{V^3} & &\Rightarrow & \frac{\partial^2 F}{\partial P\, \partial V} &= 1, & \frac{\partial^2 F}{\partial T\, \partial V} &= 0,\\
\frac{\partial F}{\partial T} &= -R & &\Rightarrow & \frac{\partial^2 F}{\partial P\, \partial T} &= 0, & \frac{\partial^2 F}{\partial V\, \partial T} &= 0
\end{aligned}$$

gegeben. Da die zweiten Ableitungen im Einklang miteinander sind, handelt es sich bei δF um ein vollständiges Differential. Die Funktion F bestimmt sich zu

$$F = \int \mathrm{d}V\, \frac{\partial F}{\partial V} = \int \mathrm{d}V \left(P - \frac{a}{V^2} + \frac{2ab}{V^3}\right) = PV + \frac{a}{V} - \frac{ab}{V^2} + g(P, T) \qquad \text{(III)}$$

mit einer noch unbekannten Funktion $g(P,T)$. Ableiten dieses Ausdrucks nach P ergibt

$$\frac{\partial F}{\partial P} = V + \frac{\partial g}{\partial P} \stackrel{!}{=} V - b \qquad \Rightarrow \qquad g(P,T) = -bP + f(T)$$

mit einer noch unbekannten Funktion $f(T)$. Ableiten von (III), nachdem $g(P,T)$ eingesetzt wurde, ergibt

$$\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\partial f}{\partial T} \stackrel{!}{=} -R \qquad \Rightarrow \qquad f(T) = -RT + \text{const.}$$

Wird die additive Konstante gleich 0 gewählt, so ergibt sich also

$$F = PV + \frac{a}{V} - \frac{ab}{V^2} - bP - RT = P(V-b) + \frac{a}{V}\left(1 - \frac{b}{V}\right) - RT.$$

b) Betrachte den Ausdruck

$$\delta F(P,V,T) = V\,\mathrm{d}P + \left(P - \frac{a}{V^2}\right)\mathrm{d}V - \left(\frac{cP}{T^2} + R\right)\mathrm{d}T.$$

Die ersten und zweiten Ableitungen sind dann durch

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial P} &= V &\Rightarrow&\quad \frac{\partial^2 F}{\partial V\,\partial P} = 1, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial T\,\partial P} = 0,\\ \frac{\partial F}{\partial V} &= P - \frac{a}{V^2} &\Rightarrow&\quad \frac{\partial^2 F}{\partial P\,\partial V} = 1, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial T\,\partial V} = 0,\\ \frac{\partial F}{\partial T} &= -\frac{cP}{T^2} - R &\Rightarrow&\quad \frac{\partial^2 F}{\partial P\,\partial T} = -\frac{c}{T^2}, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial V\,\partial T} = 0 \end{aligned}$$

gegeben. Da

$$\frac{\partial^2 F}{\partial P\,\partial T} = -\frac{c}{T^2} \neq \frac{\partial^2 F}{\partial T\,\partial P} = 0$$

ist, kann es sich bei δF nicht um ein vollständiges Differential handeln.

4. Verständnisfragen

a) Der Mikrozustand eines Systems aus N Teilchen ist durch die genaue Kenntnis aller N Ort und Impulse – also aller $6N$ Phasenraumkoordinaten – zu einer bestimmten Zeit t_0 gekennzeichnet. Mit Hilfe der Hamilton'schen Gleichungen kann dann der Zustand des Systems zu einem späteren Zeitpunkt berechnet werden.

b) Der vollständige Mikrozustand eines Systems aus sehr vielen Freiheitsgraden ist praktisch weder angebbar noch interessant. Stattdessen führt man einen Makrozustand ein, der durch wenige Parameter (wie z.B. Druck, Volumen oder Temperatur) angegeben werden kann. Mit einem Makrozustand sind in der Regel (sehr) viele Mikrozustände verträglich.

c) Das statistische Grundpostulat besagt, dass sich die Systeme eines isolierten Ensembles im Gleichgewicht mit gleicher Wahrscheinlichkeit in jedem ihnen zugänglichen Mikrozustand befinden. Dabei ist ein Ensemble eine gedachte (große) Menge makroskopisch gleichartig präparierter Systeme. Das statistische Grundpostulat ist mit dem Liouville'schen Satz verträglich.