

Theo-II: Analytische Mechanik und Thermodynamik (PTP2)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2020

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

Übungsblatt 9

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen am 29. Juni 2020

Bitte schicken Sie maximal 2 Aufgaben per E-Mail zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!

1. Maxwell-Verteilung

Die Maxwell-Verteilung beschreibt die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen der Masse m eines idealen Gases mit der Temperatur T bei einer Geschwindigkeit zwischen $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)^T$ und $\vec{v} + d\vec{v} = (v_x + dv_x, v_y + dv_y, v_z + dv_z)^T$ zu finden, und ist durch

$$f(\vec{v}) d^3v = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\vec{v}^2}{2k_B T} \right) d^3v$$

gegeben.

- Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(v)$ des Geschwindigkeitsbetrags $v = |\vec{v}|$.
- Berechnen Sie den wahrscheinlichsten und den mittleren Geschwindigkeitsbetrag, v_{\max} bzw. $\langle v \rangle$, sowie die Streuung $\sigma_v^2 \equiv \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2$. *

2. Abstand zum nächsten Nachbarn

Sei $n = N/V$ die Anzahldichte gleichverteilter Punkte in einem Volumen im sog. *thermodynamischen Grenzfall* mit $N \rightarrow \infty$ und $V \rightarrow \infty$ derart, dass $n = \text{const.}$ bleibt. Die Wahrscheinlichkeit, den nächsten Nachbarn eines gegebenen Punktes im Abstand zwischen r und $r + dr$ zu finden, sei durch $p(r) dr$ ausgedrückt.

- Begründen Sie, warum $p(r)$ der Gleichung

$$p(r) dr = 4\pi r^2 n dr \left[1 - \int_0^r dr' p(r') \right]$$

genügen muss.

- Benutzen Sie den Ansatz

$$p(r) \equiv 4\pi r^2 n \bar{p}(r),$$

um aus der vorherigen Gleichung durch Differentiation eine Gleichung für die noch zu bestimmende Funktion $\bar{p}(r)$ zu gewinnen, die durch Trennung der Variablen gelöst werden kann. Bestimmen Sie die auftretende Integrationskonstante über die Normierungsbedingung.

- Finden Sie einen Ausdruck für den mittleren Abstand $\langle r \rangle$ zwischen zwei Punkten mit Hilfe der Gammafunktion

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

* *Hinweis:* Überlegen Sie sich, wie Sie mit Hilfe von geeigneten Ableitungen Integrale der Form $\int_0^\infty dx x^n e^{-ax^2}$ für $n \geq 2$ und $a > 0$ auf die elementarerer Gauß-Integrale $\int_0^\infty dx e^{-ax^2}$ und $\int_0^\infty dx x e^{-ax^2}$ zurückführen können, deren Ergebnisse sich einfacher berechnen lassen.

3. Binomial- und Poisson-Verteilung

Zeigen Sie, daß die Binomialverteilung

$$W_N(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}$$

für $p \ll 1$ und $N \gg n$ in die Poisson-Verteilung

$$\tilde{W}_{\bar{n}}(n) = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} \quad \text{mit} \quad \bar{n} = Np$$

übergeht. Überprüfen Sie die korrekte Normierung und zeigen Sie, dass der Mittelwert mit dem Parameter \bar{n} übereinstimmt. Berechnen Sie außerdem die Varianz $\sigma^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$.

4. Verständnisfragen

- Fassen Sie den 1. und den 2. Hauptsatz der Thermodynamik mit eigenen Worten zusammen.
- Erklären Sie mit eigenen Worten, warum der Fermi-Druck auftritt und warum er vollständig temperaturunabhängig wird.
- Fassen Sie die Axiome von Kolmogorow zusammen und erklären Sie den Bayes'schen Satz.

Theo-II: Analytische Mechanik und Thermodynamik (PTP2)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2020

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

Übungsblatt 9: Lösungen

1. Maxwell-Verteilung

- a) Der Betrag der Geschwindigkeit ist durch

$$v = |\vec{v}| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$$

gegeben, es handelt sich also um einen Radius im Geschwindigkeitsraum. Folglich kann das Volumenelement in Kugelkoordinaten geschrieben werden, $d^3v = dv_x dv_y dv_z = v^2 \sin \vartheta dv d\vartheta d\varphi$. Da die gesuchte Wahrscheinlichkeitsverteilung nur von v abhängt, kann die Integration über ϑ und φ ausgeführt werden,

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi = 4\pi.$$

Somit ergibt sich für die Verteilung des Geschwindigkeitsbetrags

$$f(v) dv = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) dv = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) dv.$$

- b) Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit v_{\max} ist gegeben durch das Maximum der Verteilung $f(v)$, sodass $df/dv|_{v_{\max}} = 0$ sein muss, also unter Vernachlässigung konstanter Vorfaktoren

$$\frac{d}{dv} \left[v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) \right] = 2v \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) + v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) \left(-\frac{mv}{k_B T}\right) \stackrel{!}{=} 0.$$

Also muss

$$v \left(2 - \frac{m}{k_B T} v^2 \right) = 0$$

sein. Diese Gleichung hat die drei Lösungen

$$v_1 = 0, \quad v_2 = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}, \quad \text{und} \quad v_3 = -\sqrt{\frac{2k_B T}{m}}.$$

Da $f(v_1) = 0$ ist, scheidet v_1 als Lösung aus. Auch v_3 scheidet aus, da der Betrag einer Geschwindigkeit positiv sein muss. Da $f(v) \rightarrow 0$ sowohl für $v \rightarrow 0$ als auch für $v \rightarrow \infty$ und $f(v) > 0$ für $v \neq 0$, muss bei v_2 ein Maximum der Verteilung $f(v)$ liegen, sodass

$$v_{\max} = v_2 = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$$

ist. Die mittlere Geschwindigkeit ist durch

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty dv v f(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty dv v^3 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) \quad (\text{I})$$

gegeben. Mit $a = m/(2k_B T)$ hat dieses Integral die Form

$$\int_0^\infty dx x^3 e^{-ax^2}.$$

Das Integral kann durch eine Ableitung nach a als

$$\int_0^\infty dx x^3 e^{-ax^2} = - \int_0^\infty dx x \frac{\partial}{\partial a} e^{-ax^2} = - \frac{d}{da} \int_0^\infty dx x e^{-ax^2}$$

geschrieben werden. Das Integral

$$\int_0^\infty dx x e^{-ax^2}$$

wiederum kann elementar gelöst werden,

$$\int_0^\infty dx x e^{-ax^2} = - \frac{1}{2a} \int_0^\infty dx (-2ax) e^{-ax^2} = \frac{1}{2a} e^{-ax^2} \Big|_{x=\infty}^0 = \frac{1}{2a}.$$

Somit ergibt sich

$$\int_0^\infty dx x^3 e^{-ax^2} = - \frac{d}{da} \frac{1}{2a} = \frac{1}{2a^2}.$$

Die mittlere Geschwindigkeit (I) ist also

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{3/2} \frac{1}{2a^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{3/2} \frac{1}{2} \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^2 = 2 \sqrt{\frac{2k_B T}{\pi m}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} v_{\max} \approx 1,13 v_{\max}.$$

Das mittlere Geschwindigkeitsquadrat ist durch

$$\langle v^2 \rangle = \int_0^\infty dv v^2 f(v) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty dv v^4 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) \quad (\text{II})$$

gegeben. Wieder mit $a = m/(2k_B T)$ ist dies ein Integral der Form

$$\int_0^\infty dx x^4 e^{-ax^2}.$$

Das Integral kann durch eine zweite Ableitung nach a als

$$\int_0^\infty dx x^4 e^{-ax^2} = \int_0^\infty dx \frac{\partial^2}{\partial a^2} e^{-ax^2} = \frac{d^2}{da^2} \int_0^\infty dx e^{-ax^2}$$

geschrieben werden. Das Integral

$$\int_0^\infty dx e^{-ax^2}$$

wiederum kann durch Quadrieren und Einführen von Polarkoordinaten wie in Aufgabe 1 des Übungsblattes 7 gelöst werden,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx e^{-ax^2} &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dx e^{-ax^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\int_{-\infty}^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy e^{-a(x^2+y^2)}} = \frac{1}{2} \sqrt{2\pi \int_0^\infty dr r e^{-ar^2}} \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\frac{1}{2a}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \end{aligned}$$

Somit ergibt sich

$$\int_0^\infty dx x^4 e^{-ax^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{d^2}{da^2} \frac{1}{\sqrt{a}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(-\frac{1}{2}\right) \left(-\frac{3}{2}\right) \frac{1}{a^{5/2}} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8a^{5/2}}.$$

Das Mittel des Quadrates der Geschwindigkeit (II) ist damit durch

$$\langle v^2 \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{3/2} \frac{3\sqrt{\pi}}{8a^{5/2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T} \right)^{3/2} \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^{5/2} = \frac{3k_B T}{m}$$

gegeben. Also ergibt sich für die Streuung

$$\sigma_v^2 = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = \left(3 - \frac{8}{\pi}\right) \frac{k_B T}{m}.$$

2. Abstand zum nächsten Nachbarn

- a) Die Wahrscheinlichkeit, den nächsten Nachbarn eines Punktes im Abstand zwischen r und $r + dr$ zu finden, muss proportional zur Anzahl der Teilchen in der Kugelschale mit Radius r und Dicke dr , sein, also proportional zu $4\pi r^2 n dr$. Dass dieser Ausdruck direkt als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden kann, ist folgendermaßen zu sehen.

Da die Teilchendichte durch $n = N/V$ gegeben ist, ist das Volumen, in dem im Mittel ein Teilchen zu finden ist, durch $V = 1/n$ gegeben. Betrachtet man eine Kugel, so muss für diese

$$V = \frac{4\pi}{3} R^3 \stackrel{!}{=} \frac{1}{n} \quad \Rightarrow \quad R = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \quad (\text{III})$$

gelten, damit im Radius R im Mittel ein Teilchen zu finden ist. Sei also $\tilde{p}(r) dr$ die Wahrscheinlichkeit, in der Kugelschale mit Radius r und Dicke dr ein Teilchen zu finden, so muss

$$\int_0^R dr \tilde{p}(r) \stackrel{!}{=} 1$$

gelten, wobei R durch (III) gegeben ist. Mit $\tilde{p}(r) = 4\pi r^2 n$ ist diese Voraussetzung erfüllt, da

$$\int_0^R dr 4\pi r^2 n = \frac{4\pi}{3} R^3 n = \frac{4\pi}{3} \frac{3}{4\pi n} n = 1$$

ist. Somit ist $4\pi r^2 n dr$ also tatsächlich als Wahrscheinlichkeit zu interpretieren.

Außerdem muss $p(r) dr$ proportional zur Wahrscheinlichkeit sein, dass innerhalb der Kugel mit dem Radius r *kein* Punkt liegt. Letztere ist durch den Ausdruck $1 - \int_0^r dr' p(r')$ gegeben. Zusammengenommen muss also

$$p(r) dr = 4\pi r^2 n dr \left[1 - \int_0^r dr' p(r') \right]$$

gelten.

- b) Mit $p(r) = 4\pi r^2 n \bar{p}(r)$ ergibt sich aus der vorherigen Gleichung

$$\bar{p}(r) = 1 - \int_0^r dr' 4\pi r'^2 n \bar{p}(r').$$

Ableiten nach r ergibt

$$\frac{d\bar{p}(r)}{dr} = -4\pi r^2 n \bar{p}(r).$$

Trennung der Variablen führt auf

$$\frac{d\bar{p}}{\bar{p}} = -4\pi r^2 n dr,$$

welches elementar zu

$$\ln \bar{p} = -\frac{4\pi}{3} r^3 n + C$$

integriert werden kann. Exponentieren führt auf

$$\bar{p}(r) = C' \exp\left(-\frac{4\pi}{3} r^3 n\right)$$

mit $C' = e^C$. Somit muss also

$$p(r) = 4\pi r^2 n C' \exp\left(-\frac{4\pi}{3} r^3 n\right)$$

gelten. Da es sich bei $p(r)$ um eine Wahrscheinlichkeitsverteilung handelt, muss

$$\int_0^\infty dr p(r) = -C' \int_0^\infty dr (-4\pi r^2 n) \exp\left(-\frac{4\pi}{3} r^3 n\right) = C' \exp\left(-\frac{4\pi}{3} r^3 n\right) \Big|_{r=\infty}^0 \stackrel{!}{=} 1$$

erfüllt sein. Somit ist $C' = 1$, und man erhält

$$p(r) = 4\pi r^2 n \exp\left(-\frac{4\pi}{3} r^3 n\right).$$

c) Der mittlere Abstand ist durch

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr r p(r) = \int_0^\infty dr 4\pi r^3 n \exp\left(-\frac{4\pi}{3} r^3 n\right)$$

gegeben. Mit der Substitution

$$t = \frac{4\pi}{3} r^3 n \quad \Rightarrow \quad r = \left(\frac{3t}{4\pi n}\right)^{1/3} \quad \text{und} \quad dt = 4\pi r^2 n dr$$

wird dies zu

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int_0^\infty dt r e^{-t} = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3} \int_0^\infty dt t^{1/3} e^{-t} = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3} \int_0^\infty dt t^{4/3-1} e^{-t} = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3} \Gamma\left(\frac{4}{3}\right) \\ &\approx 0,55 n^{-1/3}. \end{aligned}$$

3. Binomial- und Poisson-Verteilung

Die Binomialverteilung ist durch

$$W_N(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n} = \frac{N!}{n! (N-n)!} p^n (1-p)^{N-n}$$

gegeben. Für $N \gg n$ gilt

$$\frac{N!}{(N-n)!} = \frac{N(N-1)\dots(N-n+1)(N-n)(N-n-1)\dots}{(N-n)(N-n-1)\dots} = N(N-1)\dots(N-n+1) \approx N^n.$$

Außerdem gilt für große N

$$\ln(1-p)^{N-n} = (N-n) \ln(1-p) \approx N \ln(1-p).$$

Für $p \ll 1$ gilt außerdem für die Taylor-Entwicklung von $\ln(1-p)$

$$\ln(1-p) \approx \ln 1 + \frac{d}{dp} \ln(1-p) \Big|_{p=0} p = \frac{-1}{1-p} \Big|_{p=0} p = -p.$$

Dies führt auf

$$\ln(1-p)^{N-n} \approx N \ln(1-p) \approx -Np$$

und somit auf

$$(1-p)^{N-n} \approx e^{-Np} = e^{-\bar{n}}.$$

Alternativ kann man für $N \gg n$ auch ausnutzen, dass

$$(1-p)^{N-n} \approx \left(1 - \frac{\bar{n}}{N}\right)^N \rightarrow e^{-\bar{n}} \quad \text{für} \quad N \rightarrow \infty$$

gilt. Fasst man alle vorherigen Ergebnisse zusammen, so ergibt sich für $N \gg n$ und $p \ll 1$ mit $Np = \bar{n}$

$$W_N(n) = \frac{N!}{n! (N-n)!} p^n (1-p)^{N-n} \approx \frac{N^n}{n!} p^n e^{-\bar{n}} = \frac{(Np)^n}{n!} e^{-\bar{n}} = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} = \tilde{W}_{\bar{n}}(n).$$

Die Normierung der Poisson-Verteilung errechnet sich zu

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} = e^{-\bar{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} = e^{-\bar{n}} e^{\bar{n}} = 1.$$

Der Mittelwert ergibt sich zu

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} = e^{-\bar{n}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{(n-1)!} = e^{-\bar{n}} \bar{n} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{n}^{n-1}}{(n-1)!} = e^{-\bar{n}} \bar{n} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} = e^{-\bar{n}} \bar{n} e^{\bar{n}} = \bar{n}.$$

Die Größe $\langle n^2 \rangle$ ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \langle n^2 \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} n^2 \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} = \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{\bar{n}^n}{(n-1)!} e^{-\bar{n}} = \bar{n} \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{\bar{n}^{n-1}}{(n-1)!} e^{-\bar{n}} = \bar{n} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} \\ &= \bar{n} \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} + \bar{n} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} = \bar{n} \cdot \bar{n} + \bar{n} \cdot 1 = \bar{n}^2 + \bar{n}. \end{aligned}$$

Somit ergibt sich die Varianz zu

$$\sigma^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = \bar{n}^2 + \bar{n} - \bar{n}^2 = \bar{n}.$$

4. Verständnisfragen

- a) 1. *Hauptsatz*: Die Änderung der inneren Energie ist gleich der zugeführten Wärmemenge minus der vom System geleisteten mechanischen Arbeit. Die innere Energie eines abgeschlossenen Systems bleibt demnach unverändert.
 2. *Hauptsatz*: In einem abgeschlossenen System kann die Entropie nicht abnehmen, sie nimmt in der Regel zu. Nur bei reversiblen Prozessen bleibt sie konstant.
- b) Fermionen, wie z.B. Elektronen, sind Teilchen, von denen höchstens zwei dieselbe Phasenraumzelle besetzen dürfen. Wenn in einem festen Volumen eine gewisse Anzahl Elektronen untergebracht werden sollen, geht das nur, wenn der Phasenraum zu genügend hohen Impulsen erweitert wird. Selbst bei $T = 0$ müssen Elektronen daher einen endlichen Druck haben, wenn sie in einem Volumen eingesperrt sind. Dieser Druck baut sich allein deswegen auf, weil Elektronen den Phasenraum – und zwar temperaturunabhängig – nicht beliebig dicht füllen dürfen.
- c) Axiome von Kolmogorow:
 - (i) Jedem zufälligen Ereignis wird eine reelle Zahl zwischen 0 und 1 zugeordnet, die sog. Wahrscheinlichkeit des Ereignisses.
 - (ii) Die Wahrscheinlichkeit des sicheren Ereignisses ist 1.
 - (iii) Bei paarweise unvereinbaren Ereignissen gilt, dass die Wahrscheinlichkeit, dass irgendeines der Ereignisse eintritt, die Summe ihrer Einzelwahrscheinlichkeiten ist. Daraus folgt, dass die Wahrscheinlichkeit, dass ein Ereignis nicht eintritt, gegeben ist durch 1 minus der Wahrscheinlichkeit, dass das Ereignis eintritt.

Der Bayes'sche Satz besagt, dass die Wahrscheinlichkeit, dass die Ereignisse A und B eintreten, durch die Wahrscheinlichkeit gegeben ist, dass das Ereignis B eintritt, gegeben, dass A eingetreten ist, mal der Wahrscheinlichkeit, dass das Ereignis A eintritt. Umgekehrt gilt natürlich genauso, dass die Wahrscheinlichkeit, dass die Ereignisse A und B eintreten, durch die Wahrscheinlichkeit gegeben ist, dass das Ereignis A eintritt, gegeben, dass B eingetreten ist, mal der Wahrscheinlichkeit, dass das Ereignis B eintritt.