Statistische Physik I (SS 2020): Tutorium 1

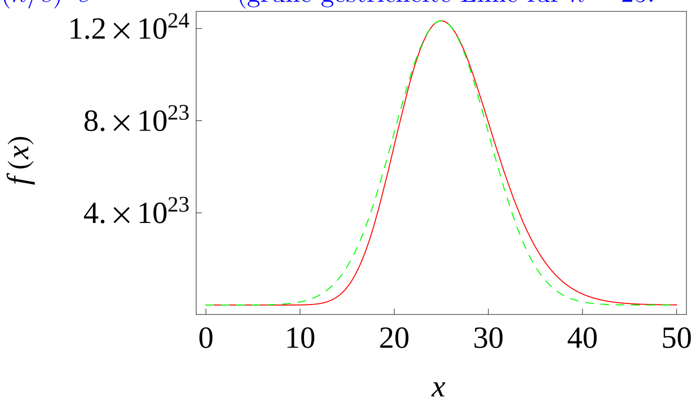
1. Stirling Formel

Betrachten Sie die Darstellung der Fakultät $n!$ als Spezialfall der Gamma-Funktion

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^\infty x^n e^{-x}\, dx. \tag{1}$$

(a) Skizzieren Sie den Verlauf des Integranden $f(x) = x^n e^{-x}$ für große n.

Der Integrand $f(x) = x^n e^{-x}$ (rote durchgezogene Linie) und seine Gaußsche Approximation $(n/e)^n e^{-(x-n)^2/(2n)}$ (grüne gestrichelte Linie für $n = 25$.



Bei der Skizze den Verlauf der zwei Funktionen x^n und e^{-x} besprechen.

(b) Schreiben Sie $f(x) = e^{g(x)}$ und entwickeln Sie den Exponenten $g(x)$ um sein Maximum.

$f(x) = x^n e^{-x} \;\to\; g(x) = n\log(x) - x$. $\frac{\partial g}{\partial x} = \frac{n}{x} - 1$ und $\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = -\frac{n}{x^2}$. Die erste Ableitung ist 0 für $x = n$. Dort ist die zweite Ableitung negativ $(-1/n)$, daher ist dies das Maximum von $g(x)$ und von $f(x)$. Taylor-Entwicklung ergibt also

$$g(x) \approx n\log(n) - n - \frac{1}{2n}(x-n)^2. \tag{2}$$

(c) Leiten Sie daraus die Stirling Formel

$$n! \approx \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n \tag{3}$$

für große n her.

Mit der obigen Taylor-Entwicklung ist

$$f(x) = e^{g(x)} \approx e^{n\log(n)-n-\frac{1}{2n}(x-n)^2} = n^n e^{-n} e^{-(x-n)^2/(2n)}. \tag{4}$$

Somit ist

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^\infty x^n e^{-x}\,dx \approx n^n e^{-n} \int_0^\infty e^{-(x-n)^2/(2n)}\,dx. \tag{5}$$

Die Bedingung $n \gg 1$ führt dazu, daß bei $x \leq 0$ $e^{-(x-n)^2/(2n)} \simeq 0$. Daher kann das Integralintervall auf

$$n! \approx n^n e^{-n} \int_{-\infty}^\infty e^{-(x-n)^2/(2n)}\,dx = \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n \tag{6}$$

erweitert werden.

(d) Begründen Sie die weitere Näherung

$$\log(n!) \approx n\log(n) - n \tag{7}$$

anhand eines konkreten Zahlenbeispiels.

Da $\log(\sqrt{n}) \ll n$ können wir weiter nähern

$$\log(n!) \approx \log\left[\sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n\right] = \log\left(\sqrt{2\pi n}\right) + \log\left[\left(\frac{n}{e}\right)^n\right] \approx n\log(n) - n. \tag{8}$$

So ist z.B. für $n = 1000$: $\log\left(\sqrt{2\pi 1000}\right) \approx 4.37$ und $1000\log(1000) - 1000 \approx 5907.8$, und da $\log(1000!) \approx 5912.1$ ist auch die weitere Näherung gut.

2. Vollständige Differentiale und integrierender Faktor

(a) Welcher der folgenden Ausdrücke ist tatsächlich ein vollständiges Differential (Begründung)?

$$\begin{aligned}
dF_1 &= (T + \frac{1}{2}V^2)dT + (V + \frac{1}{2}T^2)dV,\\
dF_2 &= \frac{3}{4}T^{\frac{1}{4}}V^{-\frac{1}{4}}dV + \frac{1}{4}T^{-\frac{3}{4}}V^{\frac{3}{4}}dT,\\
dF_3 &= T^{\frac{4}{3}}V^{\frac{1}{4}}(dV + dT).
\end{aligned}$$

Ableiten ergibt in dF_1:

$$\frac{\partial}{\partial V}\left(T + \frac{1}{2}V^2\right) = V \neq \frac{\partial}{\partial T}\left(V + \frac{1}{2}T^2\right) = T \tag{9}$$

Ableiten ergibt in dF_2:

$$\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{3}{4}T^{\frac{1}{4}}V^{-\frac{1}{4}}\right) = \frac{3}{16}T^{-\frac{3}{4}}V^{-\frac{1}{4}} = \frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{1}{4}T^{-\frac{3}{4}}V^{\frac{3}{4}}\right) \tag{10}$$

Ableiten ergibt in dF_3:

$$\frac{\partial}{\partial T}\left(T^{\frac{4}{3}}V^{\frac{1}{4}}\right) = \frac{4}{3}T^{\frac{1}{3}}V^{\frac{1}{4}} \neq \frac{\partial}{\partial V}\left(T^{\frac{4}{3}}V^{\frac{1}{4}}\right) = \frac{1}{4}T^{\frac{4}{3}}V^{\frac{-3}{4}} \tag{11}$$

Deshalb ist nur dF_2 ein vollständiges Differential.

(b) Ist $df(x,y) = xdx + (x^2/y)dy$ ein vollständiges Differential?
Nein, da: $\frac{\partial}{\partial y}(x) = 0 \neq \frac{\partial}{\partial x}\left(x^2/y\right) = 2x/y$.

Falls nicht, bestimmen Sie den "integrierende Faktor", d.h. eine Funktion $\gamma(x,y)$, so dass $dg = \gamma(x,y)df$ ein vollständiges Differential ergibt. *Hinweis:* $\gamma(x,y)$ ist nicht eindeutig.

Die Bedingung für γ lautet:

$$\partial_y[x\,\gamma(x,y)] = \partial_x[x^2\,y^{-1}\,\gamma(x,y)].$$

Es gibt mehrere mögliche Lösungen für diese Differentialglg.. Z.B., können wir den Fall mit $\gamma(x,y) = \gamma(y)$ betrachten (dh. $\partial_x\,\gamma(x,y) = 0$). Dann haben wir $\partial_y\,[\gamma(y)] = 2y^{-1}\,\gamma(y)]$, die direkt lösbar ist mit: $\gamma(y) = y^2$. Man kann nun verifizieren, dass:

$$\partial_y[xy^2] = 2xy = \partial_x[x^2y].$$

Alternativ: $\gamma(x,y) = 1/x^2$.

(c) Zeigen Sie anhand des 1. Hauptsatzes für Gase, $dE(T,V) = \delta Q - pdV$ (=vollständiges Differential), dass $\delta Q(T,V)$ im Allgemeinen kein vollständiges Differential ist.

Man hat $\delta Q = dE(T,V) + pdV$, daher

$$\delta Q = \frac{dE}{dT}dT + \left(\frac{dE}{dV} + p\right)dV.$$

Die Bedingung um die vollständige Differenzierbarkeit von δQ zu garantieren lautet: $\partial_V\left(\frac{dE}{dT}\right) = \partial_T\left(\frac{dE}{dV} + p\right)$. Da dE ein vollständiges Differential (dessen Stammfunktion $E(T,V)$ ist) ist, hat man $\partial_V\left(\frac{dE}{dT}\right) = \partial_T\left(\frac{dE}{dV}\right)$. Daher bleibt: $0 = \partial_T\,p(T,V)$, und da im Allgemeinen $\partial_T\,p(T,V) \neq 0$, ist δQ **kein** vollständiges Differential.

(d) Zeigen Sie, ausgehend von (c), dass $dY = T^{-1}\delta Q$ ein vollständiges Differential für *ideale Gase* ist. Benützen Sie für diese Aufgabe explizit die thermische und kalorische Zustandsgleichung für ideale Gase. Welcher physikalischen Größe entspricht Y?

Im Allgemeinen hätte man:

$$dY = T^{-1}\frac{dE}{dT}dT + \left(T^{-1}\left[\frac{dE}{dV} + p\right]\right)dV,$$

aber im Fall eines idealen Gases hat man $E(T,V) = \frac{3}{2}Nk_BT$ und $p(T,V) = V^{-1}Nk_BT$. Daher hat man $dY = T^{-1}\frac{3}{2}Nk_B\,dT + V^{-1}Nk_B\,dV$ und die Bedingung für die vollständige Differenzierbarkeit

$$\partial_V\left(T^{-1}\frac{3}{2}Nk_B\right) = 0 = \partial_T\left(V^{-1}Nk_B\right)$$

ist damit erfüllt. Das ist nicht überraschend, da eine quasi-statische Trafo eines idealen Gas reversibel ist, und daher entspricht dY die in der VO gegeben Definition der Entropie $dY = dS = \frac{\delta Q_{\mathrm{rev}}}{T}$.

3. Polarisierung von Kernspins

In einem NMR Experiment befinden sich in einer Probe $N = 10^{15}$ Wasserstoffkerne mit Kernspin $I = 1/2$ in einem äußeren Magnetfeld B. Jeder Spin kann entweder den Zustand $|\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\rangle$ annehmen. Die Energienniveaus der beiden Zustände im Magnetfeld sind gegeben durch

$$E_\uparrow = -\frac{\gamma\hbar}{2}B, \qquad E_\downarrow = \frac{\gamma\hbar}{2}B, \tag{12}$$

wobei $\gamma = 267.5 \times 10^6$ s^{-1}T^{-1} und $\hbar = 1.05 \times 10^{-34}$ J s^{-1}. Die Kernspins sind unabhängig von einander und $p_\downarrow$ und $p_\uparrow = 1 - p_\downarrow$ bezeichnen die Wahrscheinlichkeiten, dass sich ein einzelner Spin im Zustand $|\downarrow\rangle$ bzw. $|\uparrow\rangle$ befindet.

(a) Wie lautet die Wahrscheinlichkeit $w_N(N_\downarrow)$, dass sich genau $N_\downarrow$ Spins im Zustand $|\downarrow\rangle$ befinden?
Man hat (s. VO): $w_N(N_\downarrow) = \frac{N!}{(N-N_\downarrow)!N_\downarrow!}(1-p_\downarrow)^{N-N_\downarrow}p_\downarrow^{N_\downarrow}$

Nähern Sie diese Verteilung durch eine Gaussverteilung an und bestimmen Sie den wahrscheinlichsten Wert $\widehat{N}_\downarrow$ und die Fluktuationen $\Delta N_\downarrow$.
$\widehat{N_\downarrow} = p_\downarrow N$, und $\Delta N_\downarrow = \sqrt{p_\downarrow(1-p_\downarrow)N}$.

Reproduzieren Sie dazu die Schritte aus der Vorlesung und zeigen Sie insbesondere, dass:

$$\log\left[w_N(\widehat{N}_\downarrow + x)\right] \simeq \log\left[w_N(\widehat{N}_\downarrow)\right] - \frac{x^2}{2Np_\downarrow(1-p_\downarrow)}. \tag{13}$$

Siehe VO: (1) Näherung der Fakultäten mit Stirling: $N! \approx N\ln N - N$. (2) Verwende $\log(A+x) = \log\left[A(1+\frac{x}{A})\right] = \log A + \log(1+\frac{x}{A}) = \log A + \frac{x}{A} - \frac{x^2}{2A} + \cdots$ zur Entwicklung von $\log\left[w_N(\widehat{N}_\downarrow + x)\right]$ um maximum $\widehat{N}_\downarrow$. Die lineare Ordnung in x verschwindet, da $N_\downarrow = \widehat{N_\downarrow}$ ein Extremum der Funktion ist (per Definition von $\widehat{N_\downarrow}$). Die quadratische Ordnung lautet: $-\frac{x^2}{2}\left(\frac{1}{\widehat{N_\downarrow}} + \frac{1}{N-\widehat{N_\downarrow}}\right) = -\frac{x^2}{2}\left(\frac{N}{\widehat{N_\downarrow}(N-\widehat{N_\downarrow})}\right) = -\frac{x^2}{2}\left(\frac{1}{Np_\downarrow(1-p_\downarrow)}\right)$.

(b) Betrachten Sie nun eine thermische Verteilung mit

$$p_\downarrow = \frac{e^{-\frac{(E_\downarrow - E_\uparrow)}{k_BT}}}{1 + e^{-\frac{(E_\downarrow - E_\uparrow)}{k_BT}}}, \tag{14}$$

wobei $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J K^{-1}. Wie groß ist die Magnetisierung $M = \langle N_\uparrow\rangle - \langle N_\downarrow\rangle$ und die Standardabweichung $\Delta N_\downarrow$ bei $T = 300$ K und einem Magnetfeld von $B = 0.5$T?
$M = \langle N_\uparrow\rangle - \langle N_\downarrow\rangle = N - 2\langle N_\uparrow\rangle = N(1-2p_\downarrow) = 1.696 \times 10^9$, wobei $p_\downarrow = 0.4999991$ (da $E_\downarrow - E_\uparrow = \hbar\gamma B = 1.404 \times 10^{-26}$ J und $k_BT = 4.14 \times 10^{-21}$ J).

Ist die Magnetisierung statistisch von 0 unterscheidbar? Ist das bei einer Probe von $N = 10^9$ Spins immer noch der Fall?
Ja, weil $\Delta M = \sqrt{(\Delta N_\uparrow)^2 + (\Delta N_\downarrow)^2} = \sqrt{2p_\downarrow(1-p_\downarrow)N} = 2.23 \times 10^7$, und $M > \Delta M$. Aber, falls $N = 10^9$, gelingt das nicht mehr: $M = 1.696 \times 10^3$ und $\Delta M = 2.2 \times 10^4$, daher $M < \Delta M$.

Kreuze für: 1(a)-(d), 2(a), 2(b), 2(c)-(d), 3(a), 3(b)