Physikalisches Institut
Universität Bonn
Theoretische Physik

Übungsblatt 1
10.10.2017
WS 17/18

Theoretische Physik IV (Statistische Physik)

Prof. Dr. Albrecht Klemm
Fabian Fischbach, Christoph Nega

Abgabe: Di. 17.10.2017 (in der Vorlesung)

Der Übungsbetrieb beginnt am Dienstag, den 10. Oktober 2017.

Fragen organisatorischer Art können an die Tutoren oder an

fischbach@th.physik.uni-bonn.de bzw. cnega@th.physik.uni-bonn.de

gerichtet werden.

Die Website zu dieser Lehrveranstaltung ist unter folgender Adresse zu finden:

`http://www.th.physik.uni-bonn.de/klemm/statphyws1718/index.php`

–Anwesenheitsaufgaben–

A.1.1 Exaktheit und Integrabilität von Einsformen

Man betrachte eine glatte Einsform $\alpha = \sum_{i=1}^{n} a_i(x_1, ..., x_n)\,\mathrm{d}x_i$, wobei die auftretenden Differentiale dx_i linear unabhängig seien. Sie heißt *exakt*, falls sie das totale Differential einer glatten Funktion $F(x_1, ..., x_n)$ ist, d. h. falls gilt

$$\alpha = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial F}{\partial x_i}\,\mathrm{d}x_i \qquad \text{mit} \qquad a_i = \frac{\partial F}{\partial x_i}. \tag{1}$$

Die Vertauschbarkeit partieller Ableitungen von F gibt eine notwendige Bedingung für die Exaktheit von α (Integrabilitätsbedingung), nämlich dass α *geschlossen* ist:

$$\frac{\partial a_i}{\partial x_j} = \frac{\partial a_j}{\partial x_i} \qquad \text{für alle } i, j. \tag{2}$$

Tatsächlich ist (2) auch hinreichend, falls $x_1, ..., x_n$ Koordinaten eines einfach zusammenhängenden Gebietes sind.[1][2] Für exaktes α gilt für beliebige geschlossene, kontrahierbare Wege γ

$$\oint_\gamma \alpha = 0. \tag{3}$$

Wir wollen die Begriffe an einem Beispiel illustrieren.

[1] Das bedeutet, dass sich jedes Paar von Punkten durch einen Pfad verbinden lässt und sich ferner alle solche Pfade stetig ineinander deformieren lassen. Machen Sie sich dies zeichnerisch an einem Beispiel klar.

[2] Bemerkung: Diese Aussage ist ein Spezialfall des *Poincaré-Lemmas*.

Es sei im Folgenden $n = 2$ und $\alpha = x_1 x_2 \, \mathrm{d}x_1 + x_1^2 \, \mathrm{d}x_2$. Zeigen Sie, dass

a) die Einsform α nicht exakt ist,

b) dies jedoch auf $x_1^{-1}\alpha$ zutrifft.

c) Bestimmen Sie eine Stammfunktion $F(x_1, x_2)$ mit $\mathrm{d}F = x_1^{-1}\alpha$.

Der Faktor x_1^{-1} in diesem Beispiel ist ein *integrierender Faktor*, er macht aus α eine exakte Einsform. Dieser ist nicht unbedingt eindeutig, wie wir nun sehen.

d) Setzen Sie $f\alpha$ als exakt an und bestimmen Sie anhand der Integrabilitätsbedingung die allgemeine Form des integrierenden Faktors f für obiges Beispiel. Wie ergibt sich daraus der zuvor betrachtete Spezialfall?

A.1.2 Zustandsvariablen und Ableitungsregeln

Wir betrachten ein thermodynamisches System mit Zustandsvariablen x, y und z, welche durch eine Zustandsgleichung

$$F(x, y, z) = 0 \tag{4}$$

in Beziehung stehen. Als solche bestimmt sie x, y und z als implizite Funktionen. Geometrisch betrachtet definiert (4) eine zweidimensionale Zustandsfläche. Ohne zusätzliche Symbole einzuführen schreibt man

$$x = x(y, z), \qquad y = y(x, z) \qquad \text{oder} \qquad z = z(x, y), \tag{5}$$

wenn man eine der Zustandsvariablen als Funktion der anderen beiden betrachtet.

Sei $f(x, y)$ eine physikalische Größe, die als Funktion der Zustandsvariablen x und y gegeben ist. In der Thermodynamik werden bei partiellen Ableitungen häufig die festgehaltenen Größen explizit angegeben. Diese Notation ist hilfreich, wenn man zwischen verschiedenen Sätzen von als unabhängig betrachteten Zustandsvariablen wechselt, aber das Symbol für die physikalische Größe f beibehält. Zum Beispiel schreibt man $(\partial f/\partial x)_z$, wenn f nun als Funktion von x und z betrachtet wird und z beim Ableiten festgehalten wird. Zur Gewöhnung an diese Notation und das Rechnen mit Einsformen (Differentialen) im thermodynamischen Kontext leiten wir ein paar einfache Regeln her.

a) Berechnen Sie die totalen Differentiale der impliziten Funktionen x und y in (5). Leiten Sie hieraus folgende Regeln her:

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z = \frac{1}{\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z} \tag{6}$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1. \tag{7}$$

Hinweis: Substituieren Sie dy in dx und nutzen Sie die lineare Unabhängigkeit zweier Basiseinsformen auf der zweidimensionalen Zustandsfläche.

Seien $g(x,y), u(x,y)$ und $v(x,y)$ weitere Funktionen. Wir erinnern uns an die Jacobi-Determinante

$$\left|\frac{\partial(f,g)}{\partial(x,y)}\right| := \det\begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \\ \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x \end{pmatrix} = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_x - \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_y . \tag{8}$$

Wegen der mehrdimensionalen Kettenregel haben wir

$$\left|\frac{\partial(f,g)}{\partial(u,v)}\right| = \left|\frac{\partial(f,g)}{\partial(x,y)}\right| \left|\frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)}\right| . \tag{9}$$

Die folgenden Aufgabenteile sollen mithilfe von Beziehungen der Art (8) und (9) gelöst werden.

b) Zeigen Sie die Relation

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z . \tag{10}$$

<u>*Hinweis:*</u> Betrachten Sie $\left|\frac{\partial(f,z)}{\partial(x,z)}\right|$.

c) Zeigen Sie außerdem

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_z = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z . \tag{11}$$

<u>*Hinweis:*</u> Schreiben Sie den ersten Term auf der rechten Seite mithilfe einer geeigneten Jacobi-Determinante.

H.1.1 Wahrscheinlichkeitstheorie (1+3+1+2+1+2=10) Punkte

In dieser Aufgabe möchten wir die für die statistische Physik grundlegenden Begriffe aus der Wahrscheinlichkeitstheorie wiederholen. Hierbei betrachten wir sowohl eine diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilung, die *Binomialverteilung*, als auch eine kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilung, die *Gaußverteilung*.
Eine Zufallsvariable X ist eine Abbildung, die einem Ereignis e aus der Ereignismenge E einen Wert x aus einer Menge Ω zuordnet

$$\begin{aligned} X : E &\longrightarrow \Omega \\ e &\longmapsto x \ . \end{aligned} \tag{12}$$

Die Zufallsvariable x kann sowohl eine diskrete als auch eine kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilung besitzen, welche wir W nennen

$$\begin{aligned} W : \Omega &\longrightarrow [0,1] \\ x &\longmapsto w(x) \ . \end{aligned} \tag{13}$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung muss hierbei normiert sein[3]

$$\int_\Omega w(x)\ \mathrm{d}x = 1 \ . \tag{14}$$

Der Erwartungswert der Zufallsvariablen X ist definiert als

$$\langle X \rangle := \int_\Omega w(x) \cdot x\ \mathrm{d}x \ . \tag{15}$$

Des Weiteren sind die n-ten Momente der Wahrscheinlichkeitsverteilung definiert als

$$\mu_n := \langle X^n \rangle := \int_\Omega w(x) \cdot x^n\ \mathrm{d}x \ . \tag{16}$$

Ein Maß für die Schwankung der Wahrscheinlichkeitsverteilung um den Erwartungswert ist gegeben durch das Schwankungsquadrat[4]

$$(\Delta x)^2 := \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \, . \tag{17}$$

a) Als erste Wahrscheinlichkeitsverteilung möchten wir uns die diskrete *Binomialverteilung* anschauen. Diese gibt an, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, bei einer Abfolge von N unabhängigen Versuchen, welche nur zwei Ergebnisse "Erfolg" oder "Misserfolg" zulassen, genau k mal "Erfolg" zu erzielen. Hierbei ist die Reihenfolge der Ergebnisse nicht von Belang. Sei $0 \leqslant p \leqslant 1$ die Wahrscheinlichkeit für "Erfolg", dann lässt sich die *Binomialverteilung* ausdrücken als

$$B(k; p, N) = \binom{N}{k}\ p^k\ (1-p)^{N-k} \ , \tag{18}$$

wobei $0 \leqslant k \leqslant N$ ist, d.h. $\Omega = \{0, 1, \cdots, N\}$.

[3] Für den Fall einer diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung muss das Integral durch eine entsprechende Summe ersetzt werden.

[4] Machen Sie sich klar, dass die zweite Gleichheit nicht gefordert werden muss, sonders aus der Linearität des Erwartungswertes folgt.

i) Zeigen Sie, dass die *Binomialverteilung* normiert ist.

ii) Berechnen Sie die ersten zwei Momente der *Binomialverteilung*, d.h. $\langle X \rangle$ und $\langle X^2 \rangle$.

iii) Bestimmen Sie das Schwankungsquadrat.

b) Eine der wichtigsten kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsverteilungen ist die *Gaußverteilung*. Hierbei kann die Zufallsvariable X jede reelle Zahl annehmen, d.h. $\Omega = \mathbb{R}$. Die *Gaußverteilung* wird beschrieben durch

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, \mathrm{e}^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \; . \tag{19}$$

Wir möchten nun einige Momente dieser Verteilung berechnen.

i) Zeigen Sie, dass folgende Identität gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ax^2} \, \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \; , \tag{20}$$

wobei $a > 0$ gilt.
<u>*Hinweis:*</u> Betrachte das Integral $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-a(x^2+y^2)} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y$ in Polarkoordinaten.

ii) Berechne mit Hilfe von (20) das Integral

$$Z(J) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ax^2+Jx} \, \mathrm{d}x \; , \tag{21}$$

wobei J eine Hilfsgröße ist.

iii) Bestimme für die *Gaußverteilung* die Größen $\langle X \rangle$, $(\Delta x)^2$, $\langle X^4 \rangle$, $\langle X - \langle X^3 \rangle \rangle$ und $\langle X^{2017} \rangle$. Für die letzte Größe kann $x_0 = 0$ verwendet werden.
<u>*Hinweis:*</u> Man kann diese berechnen, indem man $\frac{\partial^n}{\partial J^n} Z(J)\big|_{J=0}$ mit den Momenten der *Gaußverteilung* in Verbindung bringt.