Universität Bonn 16.11.2010
Physikalisches Institut
Prof. Dr. J. Kroha, K. Ballmann, R. Katzer
http://www.th.physik.uni-bonn.de/th/groups/kroha/teaching/StatMech_WS10/

Theoretische Physik IV — WS 2010/11

Übungsblatt 6

(Abgabe am 23. November, Besprechung vom 23. bis 25. November)

6.1 Stirling-Formel (8 Punkte)

Integrale der Form $I_N = \int_a^b dz\ f(z)e^{-Ng(z)}$ kommen in der statistischen Physik häufiger vor. Dabei ist N eine große natürliche Zahl. Im Interval (a, b) habe $g(z)$ ein einziges Minimum an der Stelle $z = z_s$ mit $f(z_s) \neq 0$. Um dieses Integral näherungsweise zu berechenen, benutzt man die sogenannte Sattelpunktsintegration. Dazu entwickelt man die Funktionen $f(z)$ und $g(z)$ zunächst um $z = z_s$, wobei für $N \gg 1$ nur der Term $f(z_s)$ der Taylorentwicklung von $f(z)$ und die ersten beiden nichtverschwindenden Terme von $g(z)$ berücksichtigt werden. Anschließend führt man die Substitution $x = N^{1/2}(z - z_s)$ ein, wodurch das Integral I_N die Form eines Gauß-Integrals annimmt.

(a) Finde auf die angegebene Weise eine allgemeine Näherungsformel für I_N.
Hinweis: $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ e^{-\frac{a}{2}x^2} = \sqrt{2\pi/a}$

(b) Für alle $z \in \mathbb{C}$ mit $Re(z) > 0$ ist die Gammafunktion definiert als $\Gamma(z) = \int_0^\infty dt\ e^{-t}t^{z-1}$. Zeige, dass daraus $\Gamma(1) = 1$ sowie $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ folgt. Zeige anschließend durch vollständige Induktion, dass $\Gamma(N + 1) = N!$ für $N = 1, 2, 3...$ gilt.

(c) Beweise schließlich mit Hilfe der Sattelpunktsintegration die Stirling-Formel,

$$N! \approx \sqrt{2\pi N}N^N e^{-N} \quad \text{für} \quad N \gg 1\ .$$

6.2 Zustandsdichte (7 Punkte)

Wir betrachten ein quantenmechanisches Teilchen in einem d-dimensionalen Kasten der Kantenlänge L, für das die Energie-Impulsbeziehung $\varepsilon(p)$ besteht. Die Zustandsdichte $\mathcal{N}(\varepsilon)$ ist definiert als $\mathcal{N}(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d}\int d^d p\ \delta(\varepsilon - \varepsilon(p))$. Es sei nun $\varepsilon(p) = \alpha p^n$. Bestimme die Zustandsdichte in Abhängigkeit der Dimension d. Betrachte anschließend die beiden Fälle

(a) $\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m}$ für Elektronen und

(b) $\varepsilon(p) = cp$ für Photonen,

und gib jeweils die Zustandsdichte $\mathcal{N}(\varepsilon)$ für die Dimensionen $d = 1, 2, 3$ explizit an.

6.3 Polymer-Modell (Gummi) (15 Punkte)

Zur idealisierten Beschreibung der Eigenschaften eines Polymers soll angenommen werden, das System bestehe aus einer linearen Kette mit einer festen Anzahl von Gliedern N, die jeweils einen leicht knickbaren Abschnitt aufweisen. Die mikroskopischen Eigenschaften der Kette seien folgendermaßen charakterisiert:

Energie pro Kettenglied:	ε_-	(ungeknickt)
	$\varepsilon_\wedge$	(geknickt)
Länge eines Kettengliedes:	ℓ_-	(ungeknickt)
	$\ell_\wedge < \ell_-$	(geknickt)

(a) Auf die Kette wirke eine feste *äußere* Kraft K. Das Differential der inneren Energie $U(S, L, N)$ ist dann gegeben durch

$$dU = TdS + KdL + \mu dN \ ,$$

wobei der Term KdL dem bekannten Term $-pdV$ bei dreidimensionalen Systemen entspricht (vergleiche Aufgabe 4.3). Leite her, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung durch

$$W(r) = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_r - KL_r)} \quad \text{mit} \quad Z(T, K, N) = \sum_{\text{Zustände } r} e^{-\beta(E_r - KL_r)}$$

gegeben ist, wobei $E_r = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^{(r)}$ die Energie und $L_r = \sum_{i=1}^N \ell_i^{(r)}$ die Länge der Kette im Mikrozustand r ist. Verfahre dazu analog zur Herleitung der großkanonischen Wahrscheinlichkeitsverteilung in der Vorlesung und mache dir zunächst klar, wie die drei Nebenbedingungen lauten, und maximiere anschließend die Entropie S. Zeige schließlich, dass die freie Enthalpie $G(T, K, N)$ über die Relation

$$G = -k_B T \ln Z$$

mit der Zustandssumme Z verknüpft ist.

(b) Zeige, dass die Zustandssumme Z sich schreiben lässt als

$$Z = \left[e^{-\beta(\varepsilon_\wedge - K\ell_\wedge)} + e^{-\beta(\varepsilon_- - K\ell_-)} \right]^N .$$

Wie erhält man aus der freien Enthalpie G die mittlere Länge L der Kette? Bestimme L und untersuche davon ausgehend, wie das Vorzeichen des thermischen Ausdehnungskoeffizienten $\alpha = \frac{\partial L}{\partial T}$ für $K = 0$ von ε_- und $\varepsilon_\wedge$ abhängt.

(c) Bestimme für festgehaltene Länge L die kanonische Zustandssumme

$$Z_c(T, L, N) = \sum_{\text{Zustände } r} e^{-\beta(E_r)} \ .$$

Beachte dabei, dass L durch N und die Zahl der geknickten Glieder $n_\wedge$ festgelegt ist und deshalb nun nicht mehr uneingeschränkt über alle Mirkozustände summiert wird. Bestimme zuletzt über die freie Energie $F(T, L, N)$ die Kraft $K(T, L, N)$, die die Kette bei gegebener Temperatur T ausübt. Gehe dabei vom Grenzfall $N, n_\wedge \gg 1$ aus und schreibe K als Funktion von T, L und N und drücke alle Koeffizienten durch die mikroskopischen Parameter aus.