

Uitwerking Hertentamen Statistische Fysica I
Vrijdag 18 januari 2013

OPGAVE 1: 'Weetjes'

- a) In het microcanoniek ensemble, waarin alle microtoestanden dezelfde energie hebben, zijn alle microtoestanden even waarschijnlijk.
- b) De interne energie van een 1-atomig ideaal gas bedraagt $U = \frac{3}{2} Nk_B T$, namelijk een bedrag van $U = \frac{1}{2} k_B T$ per vrijheidsgraad.
- c) $U = - \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \right)_{V,N}$. Hierin is Z de partitiefunctie en β de inverse temperatuur $\frac{1}{k_B T}$.
- d) $T \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{N,V} = 1$, $T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{N,E} = p$ en $T \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} = -\mu$. Deel linker- en rechterlid van deze drie vergelijkingen door T om terug te keren naar de bekende relaties (definities van temperatuur, druk en chemische potentiaal in de vorm van partiële afgeleiden van de entropie).
- e) $\left(\frac{\partial p}{\partial S} \right)_V = - \left(\frac{\partial T}{\partial V} \right)_S$, $\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V$. Deze Maxwell relaties zijn direct af te leiden (door 2^e afgeleiden te nemen naar S en V (1^e vergelijking) en naar V en T (2^e vergelijking) van respectievelijk U en F).

OPGAVE 2: Klimaatdiscussie

- a) De gevraagde waarschijnlijkheid bedraagt:

$$P(h, \vec{v}) = C \exp\left(-\left(\frac{1}{2}mv^2 + mgh\right) / k_B T\right)$$

$$= P(0,0) \exp\left(-\left(\frac{1}{2}mv^2 + mgh\right) / k_B T\right)$$

- b) Omdat de waarschijnlijkheid bij a) in onafhankelijke factoren gescheiden kan worden voor hoogte en snelheid, zijn de waarschijnlijkheden voor hoogte en snelheid volledig onafhankelijk van elkaar. De gevraagde waarschijnlijkheid heeft dan ook de eenvoudige vorm:

$$P(h) = C' \exp(-mgh / k_B T)$$

$$= P(0) \exp(-mgh / k_B T)$$

Omdat de temperatuur onafhankelijk is van de hoogte, varieert de druk gewoon met de dichtheid van moleculen, zodat de druk hetzelfde exponentiële verloop vertoont:

$$p = p_0 \exp(-mgh / k_B T), \text{ waarbij } p_0 \text{ de druk is op hoogte nul.}$$

- c) Omdat er geen warmte-uitwisseling plaats vindt, gaat de door de gasbel geleverde mechanische arbeid pdV gaat ten koste van de interne energie van de gasbel, waarvoor het voorschrift $U = \frac{3}{2} Nk_B T$ geldt, omdat het een 1-atomig ideaal gas is (zie 1b). Dus $dU = \frac{3}{2} Nk_B dT = -pdV$. Hieruit volgt voor de temperatuurverandering van de gasbel dat

$$dT = -\frac{2}{3} \frac{p}{Nk_B} dV = -\frac{2}{3} \frac{T}{V} dV. \text{ Let op: de in deze vergelijking optredende temperatuur}$$

is die van de gasbel, en niet die van de omringende atmosfeer. Deze differentiaalvergelijking kunnen we omschrijven naar $d \ln T = -\frac{2}{3} d \ln V$, ofwel $d \ln(TV^{2/3}) = 0$. Hieruit volgt dat $TV^{2/3} = \text{const.} = T_0 V_0^{2/3}$, waarbij T_0 en V_0 een referentietemperatuur en referentie-volume zijn, bijvoorbeeld voordat de gasbel is opgestegen.

- d) We combineren de ideale gaswet met het resultaat van c) om het volume te elimineren. Daarvoor schrijven we het resultaat van c) in de vorm:

$$V = V_0 \left(\frac{T_0}{T_{\text{gasbel}}} \right)^{3/2}. \text{ Dit substitueren we in de ideale gaswet } pV = Nk_B T_{\text{gasbel}}, \text{ en}$$

verkrijgen zo:

$$pV_0 \left(\frac{T_0}{T_{\text{gasbel}}} \right)^{3/2} = Nk_B T_{\text{gasbel}}, \text{ hetgeen we kunnen omschrijven naar } T_{\text{gasbel}} = \left(\frac{p}{p_0} \right)^{2/5} T_0. \text{ Als}$$

we hierin het resultaat van b) voor de druk invullen krijgen we, tenslotte:

$$T_{\text{gasbel}} = T_0 \exp\left(-\frac{2}{5} mgh / k_B T_{\text{atmosfeer}}\right).$$

OPGAVE 3: Bungee

- a) In dit geval is het aantal opwaartse segmenten gelijk aan het aantal neerwaartse, namelijk beide $\frac{1}{2}N$. Het aantal configuraties dat daarmee mogelijk is, bedraagt

$$\binom{N}{N/2}, \text{ hetgeen overeenkomt met een entropie van}$$

$$\begin{aligned} S &= k_B \ln \binom{N}{N/2} = k_B \ln \left(\frac{N!}{[(N/2)!]^2} \right) \\ &\approx Nk_B \left[\ln N - 1 - 2 \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} N - \frac{1}{2} \right) \right] \\ &= Nk_B \left(\ln N - \ln \frac{1}{2} N \right) \\ &= Nk_B \ln 2 \end{aligned}$$

waarbij we de Stirling formule hebben gebruikt.

- b) Het eindantwoord bij a) komt overeen met een totaal aantal van 2^N configuraties. Dat is het totaal aantal configuraties, namelijk twee mogelijkheden per schakel, zonder verdere eisen aan het aantal op- en neerwaartse schakels!

- c) Algemeen:

$$\frac{x}{Na} = \frac{N_+ - N_-}{N} = \frac{N_+ - (N - N_+)}{N} = 2 \frac{N_+}{N} - 1, \text{ waaruit volgt dat } N_+ = \frac{N}{2} + \frac{x}{2a}.$$

$$\begin{aligned}
S &= k_B \ln W = k_B \ln \binom{N}{N_+} = k_B \ln \left(\frac{N!}{N_+!(N-N_+)!} \right) \\
&\approx Nk_B \left[\ln N - 1 - \frac{N_+}{N} \ln N_+ + \frac{N_+}{N} - \frac{N-N_+}{N} \ln(N-N_+) + \frac{N-N_+}{N} \right] \\
&= -Nk_B \left[\frac{N_+}{N} \ln \frac{N_+}{N} + \frac{N-N_+}{N} \ln \left(\frac{N-N_+}{N} \right) \right] \\
&= -Nk_B \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{x}{2Na} \right) \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{x}{2Na} \right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{x}{2Na} \right) \ln \left(\frac{1}{2} - \frac{x}{2Na} \right) \right] \\
&= Nk_B \left[\ln 2 - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{x}{Na} \right) \ln \left(1 + \frac{x}{Na} \right) - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{x}{Na} \right) \ln \left(1 - \frac{x}{Na} \right) \right]
\end{aligned}$$

we benaderen deze uitdrukking met een 2^e-orde Taylor-expansie in $\frac{x}{2a}$, met als resultaat

$$S \approx Nk_B \left[\ln 2 - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{Na} \right)^2 \right]$$

Dit betekent dat de entropie maximaal is voor $x=0$ en daaromheen in beide richtingen (naar boven en naar beneden) parabolisch met $|x|$ afneemt.

- d) Bij constante temperatuur moeten we hier de Helmholtz vrije energie gebruiken. Deze bedraagt in dit geval (alle configuraties hebben een energie van nul)

$$F = -k_B T \ln W = -TS \approx -Nk_B T \left[\ln 2 - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{Na} \right)^2 \right].$$

- e) Ons gewicht levert een extra bijdrage $U = mgx$ aan de vrije energie op:

$$\begin{aligned}
F &= U - TS \approx mgx - Nk_B T \left[\ln 2 - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{Na} \right)^2 \right] \\
&= \frac{k_B T}{2Na^2} x^2 + mgx - Nk_B T \ln 2
\end{aligned}$$

Deze vrije energie is minimaal als

$$x = -\frac{mgNa^2}{k_B T}.$$

- f) Hoe hoger de temperatuur, des te minder zak je naar beneden. De reden hiervoor is dat bij hoge temperatuur de entropie een steeds belangrijkere bijdrage levert aan de vrije energie. Daarmee verschuift de afweging tussen een lage potentiële energie en een hoge entropie steeds meer naar de hoge entropie, dus naar een x dicht bij nul. Een andere, maar volstrekt equivalente beschrijving is dat bij hogere temperaturen de waarschijnlijkheden voor toestanden met een hoge energie steeds minder laag worden (vanwege de kleiner wordende verschillen tussen de Boltzmann factoren). Als gevolg daarvan wordt het systeem gaandeweg steeds meer gedomineerd door situaties (hoogten) waarbij het aantal configuraties (entropie) maximaal is.