Zentralübung

Thermodynamik und Statistische Physik (T4)

Lösungsskizze Blatt 7

WiSe 2019/20

Aufgabe 1: Fehlstellen im Kristallgitter

a) Jedes Defekt hat Energie Δ, also D Defekte haben Energie $E = D \cdot \Delta$.
Die Anzahl von Mikrozuständen, die zum makroskopischen Zustand mit $E = D\cdot\Delta$ zugehören, ist die Anzahl von Möglichkeiten D Defekte in N Atomstellen zu bilden, also $\Omega = \binom{N}{D} = \frac{N!}{D!(N-D)!}$. Damit ist

$$S = k\big(\ln N! - \ln D! - \ln(N-D)!\big) = k\big(\ln N! - \ln \tfrac{E}{\Delta}! - \ln(N - \tfrac{E}{\Delta})!\big).$$

b) Die Stirling Formel ist $\ln n! \simeq n \ln n - n \implies \partial_n \ln n! \simeq \ln n$ für $n \gg 1$ und somit ist für die Temperatur

$$\begin{aligned}
\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} &= k\partial_E\big(\ln N! - \ln \tfrac{E}{\Delta}! - \ln(N - \tfrac{E}{\Delta})!\big) \\
&= -k\Delta^{-1} \ln \tfrac{E}{\Delta} + k\Delta^{-1} \ln(N - \tfrac{E}{\Delta}) \\
&\Leftrightarrow \beta\Delta = \ln\big(\tfrac{N\Delta - E}{E}\big) \Leftrightarrow E(e^{\beta\Delta} + 1) = N\Delta \\
&\Leftrightarrow D = \tfrac{E}{\Delta} = \frac{N}{e^{\beta\Delta} + 1}
\end{aligned}$$

c) Es gilt

$$\begin{aligned}
c = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial E}{\partial T} &= \Delta \frac{\partial D}{\partial T} \\
&= -k\Delta^2\beta^2 \frac{\partial D}{\partial(\beta\Delta)} \\
&= \frac{kN\Delta^2\beta^2 e^{\beta\Delta}}{(e^{\beta\Delta}+1)^2}
\end{aligned}$$

Aufgabe 2: Volumen und Oberfläche der n-Sphäre

a) Wir haben

$$\int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}^n r \ \exp(-\vec{x}^2) = \prod_{i=1}^n \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x^i e^{-x_i^2} = \prod_{i=1}^n \sqrt{\pi} = \pi^{n/2}$$

b) Wir haben jetzt, mit $y = r^2 \implies \mathrm{d}r = \frac{1}{2} y^{-1/2} \mathrm{d}y$:

$$\int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}^n r \ \exp(-\vec{x}^2) = \int_{S_1^{n-1}} \mathrm{d}\Omega_{n-1} \int_0^\infty \mathrm{d}r \ r^{n-1} e^{-r^2} = \frac{\Omega_{n-1}}{2} \int_0^\infty \mathrm{d}y \ y^{\frac{n}{2}-1} e^{-y} = \frac{\Omega_{n-1}\Gamma(\frac{n}{2})}{2}.$$

Kombination mit a) liefert $\Omega_{n-1} = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}$.

c) Wir benutzen Kugelkoordinaten und Winkelunabhängigkeit der Rechnung:

$$V_n = \int_{B_R^n} \mathrm{d}^n r = \int_0^R \mathrm{d}r \ r^{n-1} \int_{S_1^{n-1}} \mathrm{d}\Omega_{n-1} = \frac{R^n}{n} \Omega_{n-1}$$

d) Wir haben für $n = 2$, $\Omega_1 = \frac{2\pi}{\Gamma(1)} = 2\pi = \mathrm{vol}(S_1^1)$ und $V_2 = \frac{R^2}{2} 2\pi = \pi R^2 = \mathrm{vol}(B_R^2)$ wie erwartet, und auch für $n = 3$, $\Omega_2 = \frac{2\pi^{3/2}}{\Gamma(3/2)} = \frac{2\pi^{3/2}}{1/2\Gamma(1/2)} = 4\pi = \mathrm{vol}(S_1^2)$ und $V_3 = \frac{R^3}{3} 4\pi = \frac{4}{3}\pi R^3 = \mathrm{vol}(B_R^3)$ wie erwartet.

Aufgabe 3: N harmonische Oszillatoren

Betrachten Sie ein abgschlossenes System von N unterscheidbaren harmonischen Oszillatoren gleicher Frequenz ω, dessen Hamilton Funktion

$$H = \sum_{\alpha=1}^{N} \left(\frac{p_\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_\alpha^2 \right)$$

lautet. Gehen Sie im folgenden vor, wie in der Vorlesung im Beispiel des idealen Gases.

a) Berechnen Sie die Anzahl Γ von Mikrozustände bis zu einer gegebenen Energie E durch

$$\Gamma = \int_{H(p_\alpha, q_\alpha) \leq E} \mathrm{d}^N p \, \mathrm{d}^N q.$$

Benutzen Sie dazu das Resultat aus der Aufgabe 2.

b) Berechnen Sie die Entropie. Kontrolle:

$$S = kN \left[\ln \frac{E}{\omega \hbar N} + 1 \right] + k \ln \frac{\Delta E}{E},$$

wobei der letzte Term im thermodynamischen Limes entfällt.
Hinweis: Berechnen Sie die Anzahl $\Omega(E)$ von Mikrozustände im Energie-Interval $[E, E+\Delta E]$ als $\Omega(E) = \Gamma(E + \Delta E) - \Gamma(E)$.

c) Zeigen Sie $E = NkT$ und bestimmen Sie den Druck.

a) [1] Wir benutzen $q' = m\omega q$ und somit ist

$$\begin{aligned}
\Gamma &= \frac{1}{(m\omega h)^N} \int_{p^2+q^2 \leq 2mE} \mathrm{d}^N p \, \mathrm{d}^N q \\
&= \frac{1}{(m\omega h)^N} \mathrm{vol}\big(B^{2N}_{\sqrt{2mE}}\big) \\
&\overset{\text{a)}}{=} \frac{1}{(m\omega h)^N} \frac{2(2mE)^N \pi^N}{2N\Gamma(N)} \\
&= \frac{E^N}{(\hbar\omega)^N N\Gamma(N)}
\end{aligned}$$

b) Laut Hinweis, haben wir für grosse N

$$\begin{aligned}
\Omega(E) &= \frac{\partial \Gamma}{\partial E} \Delta E \\
&= \frac{E^N}{(\hbar\omega)^N \Gamma(N)} \frac{\Delta E}{E} \\
&\simeq \frac{E^N}{(\hbar\omega)^N \Gamma(N+1)} \frac{\Delta E}{E} \simeq \frac{(eE)^N}{(\hbar\omega N)^N} \frac{\Delta E}{E}
\end{aligned}$$

wo im letzten Schritt die Stirling Formel benutzt wurde. Also ist

$$S = kN \left[\ln \frac{E}{\omega\hbar N} + 1 \right] + \cancel{k \ln \frac{\Delta E}{E}}.^{2}$$

[1] Typo in der originalle Fragestellung, da sollte $\Gamma = \frac{1}{h^N} \int_{H(p_\alpha, q_\alpha) \leq E} \mathrm{d}^N p \, \mathrm{d}^N q$ stehen.

[2] Bemerkung im Vergleich zum Tutorium am 03.12: Der gestrichene Term entfällt offensichtlich nicht weil $\frac{\Delta E}{E} \simeq 0$, sondern der Grund ist wie folgend: für $N \to \infty$ muss S/N *endlich* sein also muss bei $S = kN\big[\ln \frac{E}{\omega\hbar N} + 1 + \frac{1}{N} \ln \frac{\Delta E}{E} \big]$ der letzte Term (von der Form $0 \cdot (-\infty)$) genau 0 geben.

c) Es gilt

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} = \frac{kN}{E} \implies E = kNT,$$
$$\frac{p}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N} = 0.$$