4. Tutorium - Lösungen **08.04.2011**

4.1 Einstein-Modell

a) Phasenraumvolumen in $H < E$:

$$\Phi(E) = \int_{H<E} \mathrm{d}^{3N}p\mathrm{d}^{3N}q = (\sqrt{2m})^{3N} \left(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m}\omega}\right)^{3N} \int_{r_1^2+r_2^2+..+r_{6N}^2<E} \mathrm{d}^{6N}r = \left(\frac{2}{\omega}\right)^{3N} \tilde{\Phi}$$

$$\text{mit}\, r_i := \frac{p_i}{\sqrt{2m}} \text{ und } r_{i+3N} := \sqrt{\frac{m}{2}}\omega q_i, \quad (i = 1, 2, ..., 3N)$$

$\tilde{\Phi}$ ist das Volumen einer $6N$-dimensionalen Kugel mit Radius $\sqrt{E}$:

$$\Phi(E) = \left(\frac{2}{\omega}\right)^{3N} \frac{\pi^{3N}E^{3N}}{(3N)!}.$$

Die Zahl der Zustände kann folgendermaßen definiert werden:

$$\Omega(E;\Delta) = \begin{cases} \frac{1}{h^{3N}}\left[\Phi(E) - \Phi(E-\Delta)\right] \\ \frac{1}{h^{3N}}\left[\Phi(E+\Delta) - \Phi(E)\right] \\ \frac{1}{h^{3N}}\frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{\mathrm{d}E}\Delta \end{cases}$$

Anmerkungen:

- Im Limes $\Delta \to 0$ und N groß aber konstant stimmen diese Definitionen überein. Führt man den anderen Limes durch, Δ klein aber fix und $N \to \infty$, erhält man drei unterschiedliche Resultate. (Wenn nicht genauer angegeben, sind beim Test alle drei Varianten gültig, und auch die Reihenfolge der Limiten kann frei gewählt werden, solange konsistent weitergerechnet wird. ;-))
- Achtung: An dieser Stelle wird nicht durch $N!h^{3N}$ dividiert, sondern nur durch h^{3N}. Begründen könnte man das Weglassen von $N!$ damit, dass die Atome im Festkörper fest zugewiesene Plätze haben, und dadurch „unterscheidbar" sind. Zeigen kann man es insofern, als mit dieser Wahl die Entropie eine extensive Größe wird (siehe unten).

Mögliche Lösung für Δ klein aber festgehalten und $N \to \infty$ (mit $\hbar = h/(2\pi)$):

$$\Omega(E;\Delta) = \frac{1}{h^{3N}}\left[\Phi(E) - \Phi(E-\Delta)\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}\left[1 - \underbrace{\left(\frac{E-\Delta}{E}\right)^{3N}}_{\to 0}\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}.$$

Alternative Lösung für N groß aber festgehalten und $\Delta \to 0$:

$$\Omega(E;\Delta) = \frac{1}{h^{3N}}\left[\Phi(E) - \Phi(E-\Delta)\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}\left[1 - \underbrace{\left(\frac{E-\Delta}{E}\right)^{3N}}_{1-3N\frac{\Delta}{E}}\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}3N\frac{\Delta}{E}.$$

Dieses Resultat stimmt auch mit dem Ergebnis überein, das man über die Ableitung erhält:

$$\Omega(E;\Delta) = \frac{1}{h^{3N}}\frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{\mathrm{d}E}\Delta = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N}\frac{E^{3N-1}}{(3N-1)!}\Delta.$$

b)

$$S(E,V,N) = k_B \ln\Omega(E;\Delta) = (3N-1)k_B\ln E + k_B\ln\Delta - k_B 3N\ln\hbar\omega + C(N)$$

mit

$$\begin{aligned} C(N) &= -k_B\left[\ln(3N-1)!\right] \\ &\approx -k_B\left[(3N-1)\ln(3N-1) - (3N-1)\right] \end{aligned}$$

Stirling-Formel: $\ln n! \underset{n\to\infty}{\approx} n\ln n - n$. Für große N gilt $3N-1\approx 3N$:

$$\begin{aligned} S(E,V,N) &\approx 3Nk_B\ln\frac{E}{\hbar\omega} + k_B\ln\Delta - 3Nk_B\ln(3N) + 3Nk_B \\ &= 3Nk_B\left[\ln\left(\frac{1}{3\hbar\omega}\frac{E}{N}\right)+1\right] + k_B\ln\Delta. \end{aligned}$$

In diesem Resultat ist die Entropie eine extensive Größe, d.h. wird $E\to 2E$, $N\to 2N$, und $V\to 2V$ skaliert, so skaliert auch $S\to 2S$ (unter der Annahme dass $\ln\Delta$ vernachlässigt werden kann, da N sehr groß ist). (Hätte man oben durch $N!$ dividiert, wie es sonst bei einem Gas üblich ist, hätte man $S = 3Nk_B\ln(E/N^{4/3}) + ...$ erhalten, was nicht mehr extensiv wäre).

c)

$$\left.\frac{\partial S}{\partial E}\right|_{V,N} = \frac{1}{T}, \quad\to\quad \frac{1}{T} = 3Nk_B\frac{1}{E}$$

$$T\left.\frac{\partial S}{\partial V}\right|_{E,N} = -p, \quad\to\quad p = 0.$$

Im Festkörper haben alle Atome einen vorgegebenen Platz. Das Einstein-Modell, so wie es hier verwendet wird, weist keinen Druck auf.

d) $E(T,V,N) = 3Nk_BT$.

$$C_V = \left.\frac{\partial E}{\partial T}\right|_{V,N} = 3Nk_B.$$

e) Entropie des Gases

$$S_{\text{gas}} = k_B\left[\frac{3N''}{2}\ln E'' + N''\ln V'' + C_{\text{gas}}(N'')\right]$$

Temperatur

$$\frac{1}{T_{\text{gas}}} = k_B\frac{3N''}{2E''}.$$

Weil der Festkörper und das Gas eine gleiche Temperatur haben, gilt

$$\frac{E}{3N} = \frac{2E''}{3N''}.$$

Aus $E' = E + E''$ folgt

$$E = \frac{3N}{3N+(3/2)N''}E' \quad\text{und}\quad E'' = \frac{(3/2)N''}{3N+(3/2)N''}E'$$

$$E = \frac{2N}{2N+N''}E' \quad\text{und}\quad E'' = \frac{N''}{2N+N''}E'$$

4.2 Zweidimensionales Gas

a) Phasenraumvolumen in $H < E$

$$\begin{aligned}\Phi(E) &= \int_{H<E} \mathrm{d}^{2N}p\mathrm{d}^N L\mathrm{d}^{2N}q\mathrm{d}^N\theta \\ &= (2\pi V)^N(\sqrt{2m})^{2N}(\sqrt{2I})^N \int_{p_1^2+p_2^2+\ldots+p_{3N}^2<E} \mathrm{d}^{3N}p = \left(4\pi mV\sqrt{2I}\right)^N V_{3N}(\sqrt{E})\end{aligned}$$

mit

$$p_i := \frac{p_{x,i}}{\sqrt{2m}}, \quad p_{i+N} := \frac{p_{y,i}}{\sqrt{2m}}, \quad p_{i+2N} := \frac{L}{\sqrt{2I}} \quad (i = 1, 2, ..., N).$$

$$\Phi(E) = \left(4\pi mV(2I)^{1/2}\right)^N C(N)E^{3N/2} \quad \text{mit} \quad C(N) = \frac{2\pi^{3N/2}}{3N\Gamma(3N/2)}.$$

Anzahl der Zustände:

$$\begin{aligned}\Omega(E;\Delta) &= \frac{1}{N!h^{3N}}\left[\Phi(E)-\Phi(E-\Delta)\right] = \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi mVI^{1/2}}{h}\right)^N C(N)E^{3N/2}\left(1-\left(\frac{E-\Delta}{E}\right)^{3N/2}\right) \\ &\simeq \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi mVI^{1/2}}{h}\right)^N C(N)E^{3N/2}\frac{3N}{2}\frac{\Delta}{E} \quad (N\,\text{fix},\ \Delta\to 0), \\ &\simeq \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi mVI^{1/2}}{h}\right)^N C(N)E^{3N/2} \quad (\Delta\,\text{fix},\ N\to\infty),\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}\Omega(E;\Delta) &= \frac{1}{N!h^{3N}}\frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{\mathrm{d}E}\Delta = \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi mVI^{1/2}}{h}\right)^N C(N)\frac{3N}{2}E^{3N/2-1}\Delta. \\ &= \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi^{5/2}mVI^{1/2}}{h}\right)^N \frac{1}{\Gamma(3N/2)}E^{3N/2-1}\Delta\end{aligned}$$

b) Entropie

$$S = k_B\ln\Omega(E;\Delta) = \left(\frac{3}{2}N-1\right)k_B\ln E + k_B\ln\Delta + C_1(V,N)$$

mit

$$C_1(V,N) = -k_B\ln N! + Nk_B\ln\left(\frac{2^{5/2}\pi^{5/2}mVI^{1/2}}{h}\right) - k_B\ln\Gamma\left(\frac{3N}{2}\right).$$

Für $\ln N! \approx N\ln N - N$ folgt:

$$\begin{aligned}S &\approx \frac{3}{2}Nk_B\ln E + k_B\ln\Delta - k_BN\ln N + k_BN + Nk_B\ln\left(\frac{2^{5/2}\pi^{5/2}mVI^{1/2}}{h}\right) \\ &\quad -k_B\left(\frac{3N}{2}\right)\ln\left(\frac{3N}{2}\right) + k_B\frac{3N}{2} \\ &\approx \frac{3}{2}Nk_B\left[\ln\left(\frac{2E}{3N}\right)+1\right] + Nk_B\left[\ln\left(\frac{2^{3/2}\pi^{3/2}mI^{1/2}}{\hbar}\frac{V}{N}\right)+1\right] + k_B\ln\Delta \\ &= Nk_B\left\{\ln\left[\left(\frac{4\pi E}{3N}\right)^{3/2}\frac{mI^{1/2}}{\hbar}\frac{V}{N}\right]+\frac{5}{2}\right\} + k_B\ln\Delta.\end{aligned}$$

Diese Entropie ist extensiv, da mit E/N und V/N konstant folgt, dass $S \propto N$.

Temperatur

$$T = \left(\left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{V,N} \right)^{-1} = \left(\frac{3}{2} N k_B \frac{1}{E} \right)^{-1} = \frac{2E}{3Nk_B}.$$

Wärmekapazität

$$C_V = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_{V,N} = \frac{3}{2} N k_B.$$