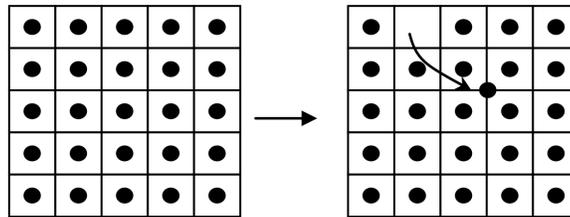

Gerhard Kahl & Bianca M. Mladek
STATISTISCHE PHYSIK 1 (VU – 136.020)

5. Tutoriumstermin (11.5.2012)

T15. Ein zwei-dimensionales, quadratisches Kristallgitter enthält N Atome. Im Kristall können sich Defekte bilden, wobei Atome die Gitterpunkte verlassen und Zwischenpositionen einnehmen (siehe Abbildung).



Die möglichen Zwischenpositionen sind in der Abbildung durch jene Punkte gegeben, wo sich Linien kreuzen. Folglich gibt es insgesamt N mögliche Zwischenpositionen. Die Anzahl an Defekten werde mit n bezeichnet. Die potentielle Energie an einer Zwischenposition ist höher als an einem Gitterpunkt; die Energiedifferenz werde mit $\varepsilon > 0$ bezeichnet.

- (i) Es seien $n \ll N$ Defekte vorhanden. Berechnen Sie die (mikrokanonische) Entropie S als Funktion der Energie $E = n\varepsilon$, falls jedes Atom nur jene vier Zwischenpositionen einnehmen kann, die seinem ursprünglichen Gitterplatz am nächsten sind. In diesem Fall können Sie annehmen, daß die Defekte weit auseinander liegen.
- (ii) Man nehme nun an, daß die n Gitterdefekte auf beliebigen der N verfügbaren Zwischenpositionen realisiert werden, wobei aber die Zwischenpositionen jeweils nur von einem Teilchen besetzt werden können. Berechne Sie für diese Umstände wieder die (mikrokanonische) Entropie S als Funktion von $E = n\varepsilon$ und vergleichen Sie mit dem Ergebnis von (i).

Berechnen Sie in beiden Fällen die Anzahl von Defekten als Funktion der Temperatur T über die kalorische Zustandsgleichung: $(\partial S / \partial E)_N = 1/T$. Verwenden Sie die Annahme, daß $k_B T \ll \varepsilon$.

Hinweise:

- (a) berechnen Sie die mikrokanonische Entropie über die möglichen Fehlstellenkonfigurationen; es handelt sich dabei um ein kombinatorisches Problem;
- (b) verwenden Sie folgende Form der Stirling-Formel: $\ln m! \sim m \ln m - m$.

T16. Gegeben sei ein ideales Gas (N Teilchen der Masse m), das der Gravitation ausgesetzt ist und das sich in einem dreidimensionalen Volumen mit quadratischer Grundfläche (Kantenlänge L) befinde. Nach oben hin (d.h. in Richtung der positiven z -Achse) sei das Volumen durch einen schweren Kolben der Masse M abgeschlossen. Das System steht in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T .

Die Hamilton-Funktion ist (unter Vernachlässigung der potentiellen Energie der Gasteilchen) gegeben durch:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{p_K^2}{2M} + M g q_K.$$

- (i) Geben Sie den Phasenraum dieses Systemes an und berechnen Sie die kanonische Zustandssumme;
- (ii) berechnen Sie ausgehend vom Ergebnis (i) die kalorische Zustandsgleichung.

T17. Gegeben ist ein System von F Freiheitsgraden, das in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T steht. Die Hamilton-Funktion sei gegeben durch

$$\mathcal{H}(z_1, \dots, z_F) = \sum_{i=1}^M c_i z_i^2 \quad (1 \leq M \leq F)$$

wobei die z_i die ersten M der F Variablen sind. Jede dieser Variablen kann die Bedeutung eines Impulses oder die einer Lage haben. Die c_i ($i = 1, \dots, M$) seien positive Konstanten und der Phasenraum Π sei gegeben durch

$$\Pi = \mathbb{R}^F.$$

Sie können davon ausgehen, daß der Beitrag zum Phasenraumintegral über die Koordinaten z_i , $i = F + 1, \dots, M$ endlich ist.

Zeigen Sie, daß

$$\langle c_j z_j^2 \rangle_k = \frac{1}{2} k_B T \quad j = 1, \dots, M.$$

Hinweis: Dieses Ergebnis ist in der Literatur als **Gleichverteilungssatz (Äquipartitionstheorem)** bekannt.