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 im Bereich $[E-\Delta, E]$ für kleines aber festgehaltenes Δ und $N \to \infty$ (mit $\hbar = h/(2\pi)$):

$$\Omega_1(E;\Delta) = \frac{1}{h^{3N}}\left[\Phi(E) - \Phi(E-\Delta)\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}\left[1 - \underbrace{\left(\frac{E-\Delta}{E}\right)^{3N}}_{\to 0}\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}.$$

Zweite Lösung im Bereich $[E, E+\Delta]$ für kleines aber festgehaltenes Δ und $N \to \infty$:

$$\Omega_2(E;\Delta) = \frac{1}{h^{3N}}\left[\Phi(E+\Delta) - \Phi(E)\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}\left[\underbrace{\left(\frac{E+\Delta}{E}\right)^{3N}}_{\gg 1} - 1\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}\left(1+\frac{\Delta}{E}\right)^{3N}.$$

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

$$\Omega_3(E;\Delta) = \frac{1}{h^{3N}}\left[\Phi(E) - \Phi(E-\Delta)\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!}\left[1 - \underbrace{\left(\frac{E-\Delta}{E}\right)^{3N}}_{1-3N\frac{\Delta}{E}}\right] = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N}}{(3N)!} 3N\frac{\Delta}{E}.$$

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

$$\Omega_4(E;\Delta) = \frac{1}{h^{3N}} \frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{\mathrm{d}E}\Delta = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\right)^{3N} \frac{E^{3N-1}}{(3N-1)!}\Delta.$$

b) Würde man die Zustandsdichte $D(E) := \lim_{\Delta\to 0}\Omega/\Delta$ berechnen wollen, so sollte man einen Ausdruck wählen, der proportional zu Δ ist, also Ω_3 oder Ω_4 (die ident sind), damit die Zustandsdichte nicht divergiert. D.h. für die Zustandsdichte muss man annehmen, dass N festgehalten wird und $\Delta \to 0$.
Hier ist aber nach der Entropie gefragt, und man erhält nur dann einen sinnvollen Ausdruck ohne störendes Δ, indem man von Ω_1 oder Ω_2 ausgeht:
Für Ω_1:

$$S_1(E,V,N) = k_B \ln \Omega_1(E;\Delta) = 3Nk_B \ln\frac{E}{\hbar\omega} - k_B \ln(3N)!$$

Für Ω_2 erhält man das gleiche, nur einen zusätzlichen Term.

$$S_2(E,V,N) = S_1(E,V,N) + 3N\ln\left(1+\frac{\Delta}{E}\right).$$

An dieser Stelle macht es Sinn, zu überprüfen, dass alle Argumente des Logarithmus dimensionslos geschrieben werden können, um Bauchweh zu vermeiden.
Anwendung der Stirling-Formel für große N: $\ln N! \underset{N\to\infty}{\simeq} N\ln N - N$.

$$\begin{aligned} S_1(E,V,N) &\simeq 3Nk_B \ln\frac{E}{\hbar\omega} - 3Nk_B\ln(3N) + 3Nk_B \\ &= 3Nk_B\left[\ln\left(\frac{1}{3\hbar\omega}\frac{E}{N}\right) + 1\right]. \end{aligned}$$

Der zusätzliche Term in $S_2(E,V,N)$ verschwindet im Limes $\Delta \to 0$:

$$3N\ln\left(1+\frac{\Delta}{E}\right) = 3N\frac{\Delta}{E} + O^2(\frac{\Delta}{E}) = O(\frac{\Delta}{E}) \simeq 0.$$

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 $S \to 2S$.
Anmerkungen:

- 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.

- Hätte man Ω_3 oder Ω_4 verwendet, würde man einen zusätzlichen Term $k_B\ln(\Delta/E)$ erhalten. Hierbei muss man sehr vorsichtig sein, Δ auf richtige Weise gegen 0 gehen zu lassen, damit der zusätzliche Term vernachlässigbar ist. (Da die Entropie extensiv ist $S \sim N$, muss der Zusatzterm $|\ln(\Delta/E)| \ll N \sim S$ erfüllen. Da wir $\Delta \ll E$ wollen, gilt $\ln(E/\Delta) \ll N$ und somit $E \gg \Delta \gg E/\exp(N)$. Das kann z.B. mit $\Delta \sim E/N \ll E$ erfüllt werden. Wem $\Delta \sim E/N = \mathrm{const}$ zu wenig rasch abfällt, kann auch $\Delta \sim E/N^p$ mit $p > 1$ nehmen.)

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

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

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

Berechnung der Anzahl der Zustände entweder über die Differenz:

$$\begin{aligned}\Omega(E;\Delta) &= \frac{1}{N!h^{3N}}\left[\Phi(E) - \Phi(E-\Delta)\right] = \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi mVI^{1/2}}{h^3}\right)^N C(N)E^{3N/2}\left(1 - \left(\frac{E-\Delta}{E}\right)^{3N/2}\right) \\ &\simeq \Omega_1(E;\Delta) = \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi mVI^{1/2}}{h^3}\right)^N C(N)E^{3N/2}\frac{3N}{2}\frac{\Delta}{E} \quad (N\,\text{fix}, \Delta \to 0), \\ \text{oder} &\simeq \Omega_2(E;\Delta) = \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi mVI^{1/2}}{h^3}\right)^N C(N)E^{3N/2} \quad (\Delta\,\text{fix}, N \to \infty),\end{aligned}$$

oder über die Ableitung:

$$\begin{aligned}\Omega_3(E;\Delta) &= \frac{1}{N!h^{3N}}\frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{\mathrm{d}E}\Delta = \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi m V I^{1/2}}{h^3}\right)^N C(N)\frac{3N}{2}E^{3N/2-1}\Delta \\ &= \frac{1}{N!}\left(\frac{2^{5/2}\pi^{5/2} m V I^{1/2}}{h^3}\right)^N \frac{1}{\Gamma(3N/2)}E^{3N/2-1}\Delta\end{aligned}$$

b) Entropie wird am einfachsten berechnet mit $\Omega_2(E;\Delta)$:

$$S = k_B \ln \Omega_2(E;\Delta) = -k_B \ln N! + N k_B \ln\left(\frac{2^{5/2}\pi^{5/2} m V I^{1/2} E^{3/2}}{h^3}\right) + k_B \ln\left(\frac{3N}{2}\right)!.$$

Natürlich könnte man es auch über $\Omega_1(E;\Delta)$ oder $\Omega_3(E;\Delta)$ berechnen. Für Ω_3 müsste man wie oben Δ durch geschickte Limes-Bildung aus dem Ergebnis der Entropie vernachlässigen, etwa durch $\Delta \sim E/N^2$.
Für $\ln N! \simeq N\ln N - N$ für $N \to \infty$ folgt

$$\begin{aligned}S &\simeq -k_B N \ln N + k_B N + N k_B \ln\left(\frac{2^{5/2}\pi^{5/2} m V I^{1/2} E^{3/2}}{h^3}\right) \\ &\quad + k_B\left(\frac{3N}{2}\right)\ln\left(\frac{3N}{2}\right) - k_B\frac{3N}{2} \\ &= \frac{3}{2}N k_B\left[\ln\left(\frac{2E}{3N}\right)+1\right] + N k_B\left[\ln\left(\frac{m I^{1/2}}{\sqrt{2\pi}\hbar^3}\frac{V}{N}\right)+1\right] \\ &= N k_B\left\{\ln\left[\left(\frac{2E}{3N}\right)^{3/2}\frac{m I^{1/2}}{\sqrt{2\pi}\hbar^3}\frac{V}{N}\right]+\frac{5}{2}\right\}.\end{aligned}$$

- Diese Entropie ist extensiv, da mit E/N und V/N konstant folgt, dass $S \propto N$.
- Eine Überprüfung der Dimensionen im Argument des Logarithmus empfiehlt sich: $[m] \sim m$, $[V] \sim l^2$, $[I] \sim l^2 m$, $[E] \sim p^2/m$, $[h] \sim pl$. Somit ist $[mVI^{1/2}E^{3/2}/h^3] \sim (ml^2 l m^{1/2} p^3)/(l^3 p^3 m^{3/2}) = 1$.

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:

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