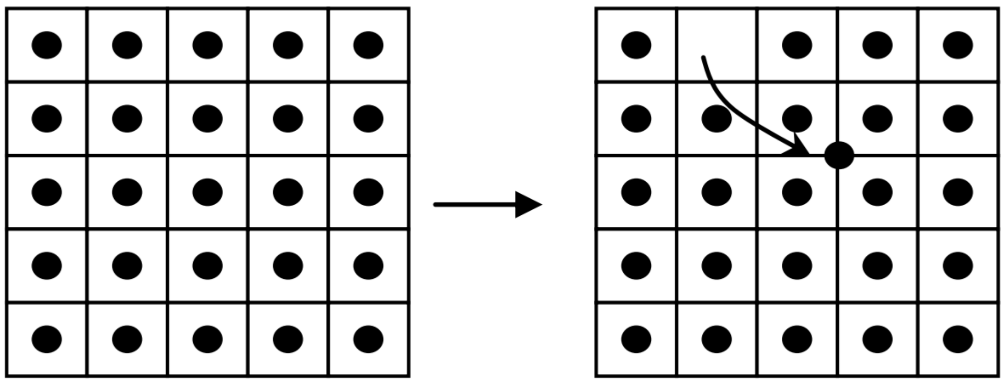
Gerhard Kahl & Florian Libisch

STATISTISCHE PHYSIK 1 (VU – 136.020)

7. Tutoriumstermin (7.6.2019)

T23. 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.

(a) 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.

(b) 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:

(i) berechnen Sie die mikrokanonische Entropie über die möglichen Fehlstellenkonfigurationen; es handelt sich dabei um ein kombinatorisches Problem; besetzt sind;

(ii) verwenden Sie folgende Form der Stirling-Formel: $\ln m! \sim m \ln m - m$).

Lösung: (a) Es gibt $\binom{N}{n}$ Möglichkeiten, die n Atome auszuwählen, die an Zwischenstellen sitzen. Für jedes dieser Atome gibt es 4 mögliche Zwischenstellen. Die mikrokanonische Zustandssumme lautet unter den gemachten Annahmen daher näherungsweise: $\Omega(E,N) \approx \binom{N}{n}4^n$. Damit hat man:

$$S(E,N) = k_B \ln \Omega(E,N) \approx k_B \left(N \ln\left(\frac{N}{\mathrm{e}}\right) - (N-n)\ln\left(\frac{N-n}{\mathrm{e}}\right) - n\ln\left(\frac{n}{\mathrm{e}}\right) + 2n\ln(2)\right) \tag{1}$$

Es folgt:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N = \frac{k_B}{\epsilon}\left(\ln\left(\frac{N-n}{n}\right) + 2\ln(2)\right) \tag{2}$$

Nach kurzer Rechnung führt dies auf:

$$n = \frac{N}{1+\frac{\mathrm{e}^{\beta\epsilon}}{4}} \approx 4N\mathrm{e}^{-\beta\epsilon} \tag{3}$$

(b) Es gibt $\binom{N}{n}$ Möglichkeiten, die n Atome auszuwählen, die an Zwischenstellen sitzen. Auch für die Wahl der Zwischenstellen gibt es nun $\binom{N}{n}$ Möglichkeiten. Also haben wir hier: $\Omega(E,N) = \binom{N}{n}^2$. Somit haben wir:

$$S(E,N) = k_B \ln \Omega(E,N) = 2k_B \left(N \ln\left(\frac{N}{\mathrm{e}}\right) - (N-n)\ln\left(\frac{N-n}{\mathrm{e}}\right) - n\ln\left(\frac{n}{\mathrm{e}}\right)\right) \tag{4}$$

Daraus erhält man:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_N = \frac{2k_B}{\epsilon}\ln\left(\frac{N-n}{n}\right) \tag{5}$$

Das führt auf:

$$n = \frac{N}{1+\mathrm{e}^{\frac{\beta\epsilon}{2}}} \approx N\mathrm{e}^{-\frac{\beta\epsilon}{2}} \tag{6}$$

Im Fall (b) sind natürlich sowohl die Entropie als auch die Anzahl der Fehlstellen wesentlich größer als im Fall (a).

T24. Betrachten Sie ein ideales Bosegas des Ruhemasse Null

$$\varepsilon(\vec{k}) = \hbar c \left|\vec{k}\right|$$

(a) Berechnen Sie das große Potential.

(b) Berechnen Sie den Druck P, die Teilchendichte $n = N/V$ und die innere Energie E als Funktionen von T, V und z.

(c) Bestimmen Sie die kritische Temperatur und die kritische Dichte der Bose-Einstein Kondensation.

(d) Bestimmen Sie im Kondensationsgebiet ($z \approx 1$) die Zahl N_0 der Bosonen im Grundzustand als Funktion der Temperatur.

(e) Bestimmen Sie die Phasengrenzkurve $P_C = f(n_C)$ des P-(1/n) Diagramms.

(f) Beweisen Sie die allgemeine Gültigkeit von $E = 3PV$ im thermodynamischen Limes ($N \to \infty$, $V \to \infty$, n endlich).

Lösung: (a) Wir denken das Gas in einem Würfel der Kantenlänge L eingeschlossen. Unter Verwendung periodischer Randbedingungen leben die Wellenvektoren $\vec{k}$ in $\frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}^3$. Man erhält damit für die kumulierte Zustandsdichte $\hat{D}$ im Kontinuumslimes $L \to \infty$:

$$\hat{D}(\epsilon) = \sum_{\vec{k}:\epsilon(\vec{k})=c\hbar k\leq\epsilon} 1 \approx \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{B_{\frac{\epsilon}{\hbar c}}(0)} d^3k = \frac{V}{6\pi^2(\hbar c)^3}\epsilon^3 \tag{7}$$

Folglich ist das große Potential:

$$J = k_BT\ln(1-z) - \int_0^\infty d\epsilon \hat{D}(\epsilon) f_{BE}(\epsilon) = k_BT\ln(1-z) - \frac{(k_BT)^4V}{\pi^2(\hbar c)^3} g_4(z) \tag{8}$$

(b) Es gilt:

$$p = -\frac{J}{V} = -\frac{k_BT\ln(1-z)}{V} + \frac{(k_BT)^4}{\pi^2(\hbar c)^3} g_4(z), \tag{9}$$

$$n = \frac{N}{V} = \frac{z}{V(1-z)} + \frac{1}{V}\int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) f_{BE}(\epsilon) = \frac{z}{V(1-z)} + \frac{(k_BT)^3}{\pi^2(\hbar c)^3} g_3(z), \tag{10}$$

$$E = \int_0^\infty d\epsilon\, \epsilon D(\epsilon) = 3\frac{(k_BT)^4V}{\pi^2(\hbar c)^3} g_4(z) \tag{11}$$

(c) Gemäß (b) gilt: $n = \frac{z}{V(1-z)} + \frac{(k_BT)^3}{\pi^2(\hbar c)^3} g_3(z) = n_0 + n'$. Für gegebenes T ergibt sich damit für die kritische Dichte:

$$n_C = n'(T, z=1) = \frac{(k_BT)^3}{\pi^2(\hbar c)^3} g_3(1) = \frac{(k_BT)^3}{\pi^2(\hbar c)^3}\zeta(3) \tag{12}$$

Für gegebenes n ist die kritische Temperatur entsprechend:

$$T_C = \frac{\hbar c}{k_B}\left(\frac{\pi^2 n}{\zeta(3)}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{13}$$

(d) Gemäß (c) hat man im Kondensationsgebiet: $n = n_0 + n' = n_0 + n\left(\frac{T}{T_C}\right)^3$, also:

$$N_0 = N\left(1-\left(\frac{T}{T_C}\right)^3\right) \tag{14}$$

(e) Wie in (f) bewiesen wird, gilt im thermodynamischen Limes: $-\frac{k_BT}{V}\ln(1-z) \to 0$. Daher haben wir in diesem Fall: $p = \frac{(k_BT)^4}{\pi^2(\hbar c)^3}g_4(z)$, was auf

$$p_C = p(T, z=1) = \frac{(k_BT)^4}{\pi^2(\hbar c)^3}g_4(1) = \frac{(k_BT)^4}{\pi^2(\hbar c)^3}\zeta(4) \tag{15}$$

führt. Gemeinsam mit

$$n_C = \frac{(k_BT)^3}{\pi^2(\hbar c)^3}\zeta(3) \tag{16}$$

folgt:

$$p_C = \hbar c\frac{\pi^{\frac{2}{3}}\zeta(4)}{\zeta(3)^{\frac{4}{3}}}n_C^{\frac{4}{3}} \tag{17}$$

(f) Angenommen, es gilt im thermodynamischen Limes: $\frac{1-z}{\frac{1}{V}} = V(1-z) \to 0$. Dann gilt natürlich $z \to 1$, und aus $n = \frac{z}{V(1-z)} + \frac{(k_BT)^3}{\pi^2(\hbar c)^3}g_3(z)$ folgt wegen der Beschränktheit von g_3, dass $n \to \infty$, im Widerspruch zur Endlichkeit (und Konstanz) von n. Folglich existiert ein $\alpha > 0$ mit $\frac{1-z}{\frac{1}{V}} \geq \alpha$ für alle hinreichend großen V. Man folgert für diese unmittelbar: $\frac{1}{1-z} \leq \frac{V}{\alpha}$, und damit hat man:

$$0 < -\frac{k_BT}{V}\ln(1-z) = \frac{k_BT}{V}\ln\left(\frac{1}{1-z}\right) \leq k_BT\frac{\ln(\frac{V}{\alpha})}{V} \to 0, \tag{18}$$

d.h. der Grundzustandsbeitrag zum Druck verschwindet im thermodynamischen Limes nach dem Einschlußprinzip.

Dementsprechend folgt: $E = 3\frac{(k_BT)^4V}{\pi^2(\hbar c)^3}g_4(z) = 3pV$.

T25. Im Rahmen des Einstein-Modells für einen **zweidimensionalen** Festkörper werden die Atomrümpfe als harmonische Oszillatoren (mit Frequenz ω) auf den Stellen des Kristallgitters betrachtet. Betrachten Sie die Oszillatoren Quantenmechanisch.

(a) berechnen Sie die kanonische Zustandssumme; beachten Sie dass die Atome durch ihren Gleichgewichtsplatz im Kristallgitter unterscheidbar sind.

(b) Berechnen Sie die Wärmekapazität c_V.

(c) Wie verhält sich ihr Resultat im Grenzfall kleiner und großer Temperaturen?

Lösung: (a) Für ein System von unterscheidbaren, nicht wechselwirkenden Teilchen zerfällt die kanonische Zustandssumme in das Produkt der Einteilchen-Zustandssummen. Man hat daher:

$$Z_K(T,N) = Z_K(T,1)^N = \left(\sum_{n_x,n_y\geq 0} \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega(n_x+n_y+1)}\right)^N = \frac{\mathrm{e}^{N\beta\hbar\omega}}{\left(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1\right)^{2N}} \tag{19}$$

(b) Die freie Energie pro Teilchen ist:

$$f(T,N) = -\frac{k_B T \ln Z_K(T,N)}{N} = 2k_B T \ln\left(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1\right) - \hbar\omega \tag{20}$$

Für die spezifische Wärmekapazität des Festkörpers gilt somit:

$$c = -T\left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_N = 2k_B \frac{(\beta\hbar\omega)^2 \mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}}{\left(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1\right)^2} \tag{21}$$

(c) Betrachte die Grenzfälle niedriger und hoher Temperaturen:

- $k_B T \ll \hbar\omega$, i.e. $\beta\hbar\omega \gg 1$:

$$c = 2k_B \frac{(\beta\hbar\omega)^2 \mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}}{\left(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1\right)^2} \approx 2k_B \frac{(\beta\hbar\omega)^2 \mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}}{\mathrm{e}^{2\beta\hbar\omega}} = 2k_B (\beta\hbar\omega)^2 \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega} \tag{22}$$

- $k_B T \gg \hbar\omega$, i.e. $\beta\hbar\omega \ll 1$:

$$c = 2k_B \frac{(\beta\hbar\omega)^2 \mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}}{\left(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1\right)^2} \approx 2k_B \frac{(\beta\hbar\omega)^2}{(\beta\hbar\omega)^2} = 2k_B \tag{23}$$

Zu kreuzen: 23a, 23b; 24ab, 24c, 24d, 24e, 24f, 25ab, 25c