Übungsblatt Nr.11

Diskussionsthema / Kontrollfragen: Großkanonisches Ensemble. Zustandssummen

32. Entropie eines Systems von harmonischen Oszillatoren

Sei ein System aus N unterscheidbaren gleichartigen harmonischen Oszillatoren mit quantisierten Energieniveaus $\big(m_i+\frac{1}{2}\big)\varepsilon$ mit einer ganzen Zahl m_i. Die Gesamtenergie dieses Systems ist $E = \big(M+\frac{N}{2}\big)\varepsilon$ mit $M \in \mathbb{N}$. Es wird angenommen, dass alle möglichen Mikrozustände mit dieser Gesamtenergie, charakterisiert durch ganze Zahlen $m_1, \dots, m_N$ mit $m_1 + \cdots + m_N = M$, gleich wahrscheinlich sind.

i. Geben Sie die statistische Entropie des Systems an.

Hinweis: Überzeugen Sie sich, indem Sie $(m_1+1)+\cdots+(m_N+1) = M+N$ schreiben, dass die Anzahl von N-Tuplen $m_1, \dots, m_N$, die der Bedingung genügen, gleich der Anzahl der Möglichkeiten ist, $N-1$ Elementen aus einer Menge von $M+N-1$ Elementen auszuwählen.

ii. Folgern Sie daraus die mittlere statistische Entropie pro Oszillator S/N in Abhängigkeit von M/N im Limes $N \to \infty$. Drücken Sie S/N im selben Limes durch E/ε aus.

Hinweis: Stirling-Formel!

iii. Drücken Sie die Gesamtenergie durch ε und die Größe $\beta \equiv (1/k_B)\partial S/\partial E$ aus.

33. Harmonische Oszillatoren im kanonischen Gleichgewicht

i. Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme $Z_1(\beta)$ für einen eindimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillator der Kreisfrequenz ω, wobei man $\varepsilon = \hbar\omega$ definiert. Was ändert sich im Fall eines zwei- bzw. dreidimensionalen isotropen Oszillators?

ii. Geben Sie die Zustandssumme $Z_N(\beta)$ für ein System aus N unabhängigen und unterscheidbaren eindimensionalen Oszillatoren mit derselben Frequenz an.

iii. Drücken Sie die statistische Entropie S für N Oszillatoren aus und berechnen Sie die mittlere Energie $\langle E\rangle$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem Resultat der Aufgabe **32.iii.** Kommentieren Sie das Ergebnis.

iv. Einstein-Modell

Sei jetzt ein System aus N dreidimensionalen isotropen Oszillatoren. Diese stellen ein Modell[1] für die N Atome eines Festkörpers dar, die um ihre jeweilige Gleichgewichtsstelle oszillieren können. Dabei wird angenommen, dass die Rückstellkraft proportional zur Auslenkung ist. Zudem hängt die Frequenz der Oszillatoren von den mechanischen Eigenschaften des Festkörpers ab. Berechnen Sie die Größe

$$C(\beta) \equiv -k_B\beta^2\,\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\beta}. \tag{1}$$

Drücken Sie $C(\beta)$ durch die Variable $x \equiv \beta\hbar\omega$ und die Anzahl n der Molen von Atomen im Festkörper aus und skizzieren Sie $C(x)/n$ für $0 \le x \le 1$.

Hinweis: Die universelle Gaskonstante ist $R = N_A k_B$ mit der Avogadro-Konstante N_A.

34. Zweiniveausystem im kanonischen Gleichgewicht

Sei ein System aus N nicht-wechselwirkenden, unterscheidbaren Teilchen, die sich in zwei Zuständen mit Energien $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ befinden können.

[1] A. Einstein, Ann. Phys. (Leipzig) **22** (1907) 180–190 & 800.

i. Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme $Z_N(\beta)$. Wie groß ist bei gegebenem β die mittlere Teilchenzahl im oberen Niveau? Welche Werte nimmt β an, wenn diese mittlere Teilchenzahl größer als $N/2$ ist?

ii. Sei $C(\beta)$ definiert durch Gl. (1). Skizzieren Sie $C(\beta)$ in Abhängigkeit von $1/\beta$. Interpretieren Sie das Resultat, indem Sie annehmen, dass $C(\beta)$ die Wärmekapazität des Systems ist.