Prof. Holger Stark (Sprechstunde: Fr 11:30-12:30 in EW 709)
Dr. Johannes Blaschke (Sprechstunde: Mi 10:00-11:00 in EW 708)

7. Übungsblatt – Statistische Physik

Abgabe/Vorrechnen: Mo. 08.06.2015 im Tutorium (16:00 - 17:30 EW 731)

M Aufgabe 22: *Mikrokanonische Entropie*

(a) Zeigen Sie, dass für eine zweifach differenzierbare Funktion $f(x)$ mit einem globalem Maximum in x_0 im Grenzfall $N \to \infty$ folgende Näherung gilt

$$\int_a^b e^{Nf(x)} \mathrm{d}x \approx \sqrt{\frac{2\pi}{N|f''(x_0)|}} e^{Nf(x_0)} ,$$

wobei $a < x_0 < b$.

(b) Die Gesamtanzahl der Konfigurationen mit Gesamtenergie U eines isolierten Behälters, der aus zwei Teilbehältern besteht, ist

$$g(U) = \int \exp\left[\frac{S_1(U_1) + S_2(U_2)}{k_B}\right] \mathrm{d}U_1 , \tag{5.10}$$

wobei U_i und S_i die innere Energie bzw. Entropie des Teilbehälters $i = 1, 2$ ist und $U = U_1 + U_2$. Zeigen Sie, dass im thermodynamischen Limes die Gesamtentropie des Systems gegeben ist durch

$$S(U) = S_1(U_1^*) + S_2(U - U_1^*) , \tag{5.12}$$

wobei U_1^* der Wert von U_1 ist, für den die Summe $S_1(U_1) + S_2(U - U_1)$ maximal wird.

S Aufgabe 23 (5 Punkte): *Äquipartitionstheorem und Virialgleichung*

(a) Beweisen Sie das Äquipartitionstheorem

$$\left\langle x_k \frac{\partial H}{\partial x_k} \right\rangle = k_B T; \qquad x_k = q_k, p_k , \tag{5.23}$$

im kanonischen Ensemble mit Hamiltonian H.

(b) Gegeben sei der Hamiltonian eines nicht-idealen Gases

$$H = \sum_i \left(\frac{1}{2m} \boldsymbol{p}_i^2 + V_{\text{wand}}(\boldsymbol{q}_i) \right) + V_{\text{ww}}(\{\boldsymbol{q}_i\}) , \tag{5.25}$$

wobei V_{wand} das Potential der Behälterwände ist und V_{ww} die Wechselwirkung der Gasteilchen untereinander beschreibt. Verwenden Sie das Äquipartitionstheorem um die Virialzustandsgleichung herzuleiten:

$$PV = Nk_BT - \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{N} \left\langle \boldsymbol{q}_i \cdot \frac{\partial V_{\text{ww}}(\{\boldsymbol{q}_i\})}{\partial \boldsymbol{q}_i} \right\rangle . \tag{5.26}$$

M **Aufgabe 24**: *Zufallsgeher auf kubischem Gitter*

(a) Betrachten Sie ein Teilchen, das in jedem Zeitschritt τ einen Sprung der Länge a in zufälliger Richtung auf einem kubischen Gitter macht. Leiten Sie die Mastergleichung für diesen Sprungprozess her.

(b) Machen Sie eine geeignete Taylorentwicklung in Ort und Zeit um die Diffusionsgleichung zu erhalten. Was ist die Diffusionskonstante D?

(c) Wie lautet die Fundamentallösung $p(\mathbf{r}, t)$?

(d) Berechnen Sie $\langle r^2 \rangle$.

Hinweis: Eine Mastergleichung verbindet die Zeitentwicklung einer Zustandsverteilung mit den Übergansraten einzelner Zustände. Die Gleichung in Aufgabe 18 (b) ist ein Beispiel einer Zeitdiskreten Mastergleichung.

S **Aufgabe 25 (10 Punkte):** *Gummielastizität (5x2P.)*
Im Folgenden sollen die thermodynamischen und mechanischen Eigenschaften von Gummi untersucht werden. Betrachten Sie dazu zunächst eine Materialprobe der Länge L, die entlang einer Achse deformiert wird.

(a) Zeigen Sie, dass im Allgemeinen die resultierende Kraft f einen enthalpischen und einen entropischen Anteil hat:

$$f = \left.\frac{\partial H}{\partial L}\right|_{T,P} - T \left.\frac{\partial S}{\partial L}\right|_{T,P} .$$

Zeigen Sie ferner, dass für eine Metallprobe der entropische Anteil verschwindet und f nicht von der Temperatur abhängt.

Nun zu Gummi. Ein Ende eines Polymers sei im Koordinatenursprung und ein Ende am Ort $\mathbf{r}$. Um die Wahrscheinlichkeit dieser Konfiguration zu berechnen, kann man eine Analogie zur Diffusion herstellen: die Konfiguration wird durch den Pfad eines Zufallsgehers, mit fester Schrittlänge l, generiert. Nehmen Sie dabei an, dass $\langle r^2 \rangle = r_0^2 = Nl^2$ für N Monomere.

(b) Wie lautet die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(r)$ für den Abstand der beiden Polymerenden? Berechnen Sie die Freie Energie des Polymers.

(c) Betrachten Sie nun eine Deformation $x = \alpha_1 x_0$, $y = \alpha_2 y_0$, $z = \alpha_3 z_0$ des Polymers und berechnen Sie die Änderung der Freien Energie aufgrund dieser Deformation.

(d) Ein Gummiquader, der aus N Polymermolekülen besteht und dessen Volumen V konstant bleibt, wird nun entlang einer Achse deformiert. Wie lautet die Kraft als Funktion der Deformation α? Berechnen Sie die Federkonstante von Gummi.

(e) Berechnen und skizzieren Sie die Entropie als Funktion von α und diskutieren Sie den Funktionsverlauf.