

Prof. Dr. Harald Engel  
Dr. Jan F. Tötz

### 1. Übungsblatt – TP VI: Statistische Physik des Gleichgewichts

**Abgabe: Bis Mi. 07.11.2018 14:15 Uhr vor Beginn des Tutoriums im EW 731**

*Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden sehr ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte das Deckblatt von der Homepage verwenden! Die Abgabe erfolgt in Zweiergruppen.*

#### **Aufgabe 1 (10 Punkte):** Gibbs'sches Paradoxon und Mischungsentropie

In dieser Aufgabe sollen die Grenzen der Annahme von unterscheidbaren Teilchen untersucht werden.

- (a) Zeigen Sie, dass für ein klassisches Gas aus unterscheidbaren Teilchen die Entropie  $S$  gegeben ist durch

$$S(T, V, N) = Nk_B \ln V + \frac{3}{2}Nk_B \left[ 1 + \ln \left( \frac{2\pi mk_B T}{h^2} \right) \right].$$

Die Variablen  $N$ ,  $T$  und  $V$  stehen für die Teilchenzahl, die Temperatur und das Volumen. Die Konstanten  $m$ ,  $k_B$  und  $h$  sind Masse, Boltzmann-Konstante und Wirkungsquantum.

- (b) Man betrachte jetzt zwei verschiedene Gase mit den Volumina  $V_1$  und  $V_2$ , den Teilchenmassen  $m_1$  und  $m_2$ , bestehend aus  $N_1$  bzw.  $N_2$  Teilchen in zwei durch eine Trennwand voneinander getrennten Behältern. Die Dichten  $N_i/V_i$  beider Gase seien gleich. Zeigen Sie, dass die Gesamtentropie des Systems nach dem Entfernen der Trennwand gegenüber der Summe der Einzelentropien erhöht wird um

$$\Delta S = k_B \left[ N_1 \ln \frac{N_1 + N_2}{N_1} + N_2 \ln \frac{N_1 + N_2}{N_2} \right].$$

Dies ist die sogenannte Mischungsentropie.

- (c) Betrachtet man zwei identische Gase, so führt das Mischen ebenfalls zu einer Entropiezunahme  $\Delta S$ . Das darf allerdings nicht sein, da das Mischen gleichartiger Gase mit gleichen Dichten ein reversibler Prozess ist (das Wiedereinsetzen der Trennwand stellt den Ausgangszustand wieder her im Gegensatz zu dem Fall in dem eine tatsächliche Mischung stattfindet). Dies ist das Gibbs'sche Paradoxon. Zeigen Sie, dass man dieses Paradoxon beheben kann, indem man den sogenannten Gibbs'schen Korrekturfaktor  $N!$  einführt:

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{N!} \mathcal{Z}_1^N.$$

Dies ist die Zustandssumme für ununterscheidbare Teilchen.

1. Übung WS 18/19

**Aufgabe 2 (10 Punkte):** *Polarisation eines idealen diatomaren Gases*

Betrachten Sie ein ideales Gas bestehend aus  $N$  ununterscheidbaren diatomaren Molekülen mit konstantem elektrischen Dipolmoment  $\mu$  unter Einfluss eines externen elektrischen Feldes  $E$ .

- (a) Welche Freiheitsgrade hat ein Molekül des Gases? Stellen Sie den Hamiltonian

$$H = H(\underline{q}, \underline{p}, \phi, \theta, L_\phi, L_\theta)$$

des Systems auf. Hierbei stehen die Variablen  $\underline{q}, \underline{p}$  für Orte und Impulse,  $\phi, \theta$  für Orientierungswinkel und  $L_\phi, L_\theta$  für Drehimpulse.

- (b) Wie lautet die zugehörige Zustandssumme  $Z$ ?  
(c) Bestimmen Sie aus der freien Energie  $F$  die Polarisationsdichte  $P$  zu

$$P = \frac{N}{V} \mu \left( \coth(\beta \mu E) - \frac{1}{\beta \mu E} \right).$$

Tipp: Wie lauten die Differentiale der inneren Energie und der freien Energie?

- (d) Zeigen Sie, dass für  $\mu E \ll k_B T$  die Permittivität  $\epsilon$  gegeben ist durch

$$\epsilon = 1 + \frac{N \mu^2 \beta}{3V}.$$

- (e) Ein Beispiel für ein diatomares Molekül ist gasförmiger Chlorwasserstoff HCl. Sein interatomarer Abstand ist  $d = 0,127 \text{ nm}$ . Wie vergleicht sich sein gemessenes Dipolmoment von  $\mu_{\text{ex}} = 3,09 \times 10^{-16} \text{ V/cm}$  mit dem theoretischen?

(Bonus: +10) Schreiben Sie ein Programm zur Simulation eines idealen Gases mit  $N = 10^6$  Teilchen. Berücksichtigen Sie die Dipolmomente der Teilchen. Verifizieren Sie Ihre theoretischen Vorhersagen aus (a-d) numerisch. Wie erklären Sie Abweichungen?

Vorlesung:	<ul style="list-style-type: none"><li>• Di 10:00 Uhr – 12:00 Uhr im EW 202</li><li>• Do 14:00 Uhr – 16:00 Uhr im EW 202</li></ul>
Übung:	<ul style="list-style-type: none"><li>• Mi 14:00 Uhr – 16:00 Uhr im EW 731</li></ul>
Website:	<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="http://www.tu-berlin.de/?198939">http://www.tu-berlin.de/?198939</a></li></ul>
Scheinkriterien:	<ul style="list-style-type: none"><li>• Mindestens 50% der Übungspunkte</li><li>• Regelmäßige und aktive Teilnahme am Tutorium</li><li>• Abgeschlossene Projektarbeit</li></ul>