Statistische Physik
Übungsblatt 5

Vorlesung: Prof. Dr. Otfried Gühne
Übungen: Florian Köppen, Tobias Moroder

Abgabe: Fr, 24. Mai 2013

1. **Harmonische Oszillatoren** (6 Punkte)
   Die Energieeigenwerte des eindimensionalen harmonischen Oszillators sind gegeben durch

$$E_\omega(n) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{1}$$

   mit der Besetzungszahl $n = 0, 1, \ldots$ und der Frequenz ω. Dieses Spektrum ist nicht entartet.

   (a) Berechnen Sie die freie Energie als Funktion der Temperatur.

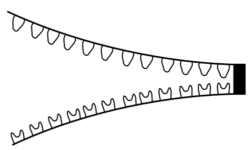
   (b) Wie verhält sich die freie Energie in den Grenzfällen hoher und niedriger Temperatur?

   Nun betrachten wir den Fall von $3N$ unabhängigen harmonischen Oszillatoren. Die entsprechenden Eigenzustände $|n_1, \ldots, n_{3N}\rangle$ mit $n_i \in \mathbb{N}$ besitzen dann die Energie

$$E(n_1, \ldots n_{3N}) = \sum_{i=1}^{3N} E_{\omega_i}(n_i). \tag{2}$$

   (a) Berechnen Sie die Zustandssumme unter der Einstein-Annahme $\omega_j = \omega_E$ für alle $j = 1, \ldots, 3N$.

   (b) Betrachten Sie die Wärmekapazität $C = \partial_T U$ und diskutieren Sie das Ergebnis für $T \ll T_E$ und $T \gg T_E$, mit der Einstein-Temperatur $T_E = \beta\hbar\omega_E$. Vergleichen Sie dies mit dem klassischen Ergebnis $C_{\text{classical}} = 3Nk_B$, welches als Dulong-Petit-Gesetz bekannt ist.

2. **Reißverschluss** (4 Punkte)
   
   Wir betrachten zwei Kettenmoleküle A und B mit ihren reaktiven Gruppen $k = 0, \ldots, N$. Die Moleküle sind bei $k = 0$ stets verbunden, so dass jeweils nur N Gruppen frei sind. Die beiden Ketten verschließen sich wie ein Reißverschluss, d.h. die Gruppen k aus beiden Molekülen können sich nur verbinden, falls bereits alle Gruppen $\ell < k$ verbunden sind. Die Bindungsenergie zwischen der k-ten Gruppe des Moleküls A und der k-ten Gruppe des Moleküls B betrage ε.

   (a) Berechnen Sie die mittlere Anzahl $\langle G\rangle$ der offenen Verbindungen als Funktion der Temperatur sowie als Funktion der Variablen $x \equiv \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}$. *Hinweis:* Stellen Sie zunächst den Hamiltonoperator auf – die Quantenzustände für i und j offene Verbindungen erfüllen $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$.

   (b) Betrachten Sie $\langle G\rangle$ für den Fall hoher und tiefer Temperatur.

   (c) Betrachten Sie $\langle G\rangle$ und $\langle G\rangle/N$ für sehr lange Ketten.

   (d) Betrachten Sie $\langle G\rangle$ für festes T und verschwindende Bindungsenergie, wobei (i) N konstant oder (ii) εN konstant ist.

3. **Gasadsorption** (4 Punkte)
   Ein Gas befinde sich in Kontakt mit einer Oberfläche, welche an M Stellen je maximal ein Teilchen des Gases adsorbieren kann. Bei der Adsorption werde die Energie b frei.

   (a) Berechnen Sie die mittlere Anzahl $\langle n\rangle$. *Hinweis:* Rechnen Sie großkanonisch (mit chemischem Potential μ) und betrachten Sie zunächst den Fall $M = 1$.

   (b) Berechnen Sie die Entropie des Gleichgewichtszustandes.

   (c) Betrachten Sie die Entropie für $T \to \infty$. Wird die Entropie maximal?

   (d) Berechnen Sie die Entropie für $T \to 0$. Unterscheiden Sie dabei die 3 möglichen Fälle für das Vorzeichen von $-b - \mu$.