Übung zur Vorlesung T4, Blatt 6

22.11.2011

1. **Zeitentwicklung der Entropie**

Betrachten Sie eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\{p_i, q_i\}, t)$ im Phasenraum. Hierzu gehört die Entropie

$$S(t) = -\int d\Gamma \rho \ln \rho,$$

wobei $d\Gamma$ ein Volumenelement im Phasenraum ist.

a) Zeigen Sie, dass
$$\frac{dS}{dt} = 0 \ .$$
Verwenden Sie hierzu, dass ρ die Liouville Gleichung erfüllt.

b) Bestimmmen Sie die Funktion ρ_{max}, die die Entropie $S[\rho]$ unter der Nebenbedingung $\langle H \rangle = E$ maximiert, wobei H der Hamiltonian ist. Verwenden Sie hierzu Lagrange Multiplikatoren.

c) Zeigen Sie, dass $\frac{\partial \rho_{max}}{\partial t} = 0$.

2. **Fehlstellen im Kristallgitter**

Wir betrachten einen Kristall aus N identischen Atomen. Ein *Schottky Defekt* ist einfach ein fehlendes Atom, d.h. eine Leerstelle im Kristallgitter. Durch Sprünge von Atomen können sich diese Defekte "durch den Kristall bewegen" und bilden somit eine Art Gittergas. Δ sei die Energie, die man zur Bildung eines solchen Schottky-Defektes aufwenden muss, d.h. diese Energie ist nötig, um ein Atom aus dem Innern des Kristalls an seine Oberfläche zu bringen und dabei eine Fehlstelle zurückzulassen. Wir nehmen an, dass diese Energie sowohl von der Lage des Atoms innerhalb des Kristalls wie auch von der Zahl der schon vorhandenen Defekte unabhängig ist. Die Anzahl der Defekte sei D.

a) Wie gross sind Energie und Entropie eines Kristalls mit D Defekten? (Nullpunkt: Kristall ohne Defekte)

b) Berechnen Sie die Anzahl der Fehlstellen in Abhängigkeit von der Temperatur. Ergebnis:
$$D(T) = \frac{N}{1 + e^{\frac{\Delta}{kT}}}$$

c) Berechnen Sie nun den Beitrag der Defekte zur Wärmekapazität $c = \frac{\partial U}{\partial T}$

3. **Polymere**

Wir betrachten eine lineare Kette aus N Molekülen, von denen sich jedes in einem von drei Zuständen α, β oder γ befinden kann. Die Längen der Moleküle in den 3 Zuständen seien a, b, c mit $a : b : c = 1 : 2 : 3$, die Energie des Zustandes β sei um Δ niedriger als die der Zustände α und γ, (für die Energie von β können sie $E_\beta = 0$ annehmen). Das System sei abgeschlossen. Finden Sie zunächst die Entropie als Funktion der Energie E und der Länge L des Polymers. Berechnen Sie nun die Spannung J des Polymers. Diese Rechnung ist analog zur Berechnung des Drucks aus der Entropie für den Fall 3 dimensionaler Systeme. Bestimmen Sie die Gleichgewichtslänge L_0 des Fadens, dies ist die Länge, bei der die Spannung verschwindet und zeigen Sie, das diese temperaturunabhängig ist. Zeigen Sie, dass im Grenzfall $\Delta << KT$ und $bJ << kT$ das Hooke'sche Gesetz erfüllt ist: $L - L_0 = \gamma(T)J$ und berechnen Sie die "Federkonstante" γ. Wird das Polymer mit zunehmender Temperatur "weicher" oder "härter"?