Ein Festkörpermodell - mikrokanonisch und kanonisch

1. N Massenpunkte sind harmonisch an N Ruhelagen $\xi_i \in \mathbb{R}^s$ gebunden. Die Hamiltonfunktion des Systems sei durch $H : \mathbb{R}^{sN} \times \mathbb{R}^{sN} =: \Omega \to \mathbb{R}$ mit

$$H(x_1, \dots x_N, p_1 \dots p_N) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{|p_i|^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} |x_i - \xi_i|^2 \right)$$

gegeben. Ist für $E \in \mathbb{R}$ die Menge $D(E) = \{\omega \in \Omega : H(\omega) \leq E\}$, dann ist für $E > 0$ die Entropie der Gleichverteilung auf $D(E)$ durch

$$S(M_E) = k \ln \frac{|D(E)|}{h^{sN}}$$

definiert. Ein Faktor $N!$ im Nenner wird *nicht* benötigt zur Bildung eines thermodynamischen Limes! Zeigen Sie, dass mit Stirlings Näherung für $N \gg 1$ folgt

$$S(M_E) \approx kN \ln \left[\left(\frac{e}{s} \right)^s \left(\frac{E}{N\hbar\omega} \right)^s \right].$$

Welche kalorische Zustandsgleichung hat das System für $N \gg 1$? Zeigen Sie für $s = 3$, dass die Wärmekapazität des Systems durch $C = 3Nk$ gegeben ist. (Dulong-Petit Gesetz)

2. Sei Γ_β für $\beta > 0$ das Gibbsmaß auf Ω zur Hamiltonfunktion von Beispiel 1. Es hat (bezüglich des Lebesguemaßes von Ω) die Dichte

$$\rho(\omega) = \frac{e^{-\beta H(\omega)}}{Z(\beta)}.$$

Bestimmen Sie $Z(\beta)$ und berechnen Sie daraus den Energieerwartungswert mittels

$$\langle H \rangle_{\Gamma_\beta} = -\frac{\partial_\beta Z(\beta)}{Z(\beta)}.$$

Hinweis: Das hochdimensionale Integral faktorisiert in eindimensionale. Welche kalorische Zustandsgleichung hat Γ_β?

Aus der freien Energie von Γ_β

$$F(\Gamma_\beta) = -kT \ln \frac{Z(\beta)}{h^{sN}} =: \mathcal{F}(T, N)$$

ergibt sich die Entropie von Γ_β mittels

$$S(\Gamma_\beta) = -\partial_T \mathcal{F}(T, N).$$

Prüfen Sie mit Stirlings Approximation, ob für $N \gg 1$ und für $E = \langle H \rangle_{\Gamma_\beta}$

$$S(\Gamma_\beta) \approx S(M_E)$$

folgt.