INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. U. Motschmann
Dipl.-Phys. T. Bagdonat

THERMODYNAMIK UND STATISTIK — WS 1999/2000

13. Übungsblatt — Abgabe: Donnerstag, 3.2.2000, bis 11^{25} Uhr

Sprechstunde: T. Bagdonat, A317, Dienstag ab 14^{00} Uhr, Tel.: 391-5187
Ein Link zu dieser Vorlesung: `http://www.tu-bs.de/institute/theophys/edu.html`

35. **Ordnung in einer zweikomponentigen Legierung.** Man betrachte ein Kristallgitter, daß aus zwei Untergittern a und b aus je N Gitterplätzen besteht (man denke z.B. an ein bcc-Gitter). Im geordneten Fall ($T = 0$) seien alle Plätze des a-Gitters mit Atomen der Sorte A und alle des b-Gitters mit Atomen der Sorte B besetzt (z.B. NaCl). Bei thermischer Anregung wird der Kristall zusehends in Unordnung geraten. Diese Unordnung beschreibt man mit dem long-range-order Parameter $0 \leq \mathcal{X} \leq 1$, der so definiert ist, daß

$$n_a^A = \tfrac{1}{2}N(1+\mathcal{X}) \qquad n_b^A = \tfrac{1}{2}N(1-\mathcal{X})$$
$$n_a^B = \tfrac{1}{2}N(1-\mathcal{X}) \qquad n_b^B = \tfrac{1}{2}N(1+\mathcal{X})$$

gilt, wobei n_x^X die mittlere Anzahl der Atome X auf dem Untergitter x bezeichnet. Wie man sieht, bedeutet $\mathcal{X} = 0$ totale Unordnung und $\mathcal{X} = 1$ absolute Ordnung.

Es wird ein einfaches Wechselwirkungsmodell der Atome untereinander angenommen. Ein Paar aus zwei direkt benachbarten A-Atomen trage zur inneren Energie den Beitrag ϵ_{AA}, ein Paar aus B-Atomen ϵ_{BB} und ein A-B-Paar ϵ_{AB} bei. Je nach Vorzeichen dieser Beiträge kann man verschiedene Situationen modellieren (z.B. mischbare oder nicht mischbare Legierungen, oder auch Antiferromagneten), was aber hier nicht weiter beachtet werden soll.

(a) Angenommen, die Anordnung der Atome auf die Gitterplätze sei rein zufällig, jedoch mit einer Verteilung, die durch $\mathcal{X}$ wie oben beschrieben wird. Die mittlere Anzahl von direkt benachbarten XY-Paaren sei n^{XY}, wobei angenommen werden soll, daß jeder a-Gitterplatz q nächste b-Nachbarn und umgekehrt haben soll (im bcc-Gitter wäre z.B. $q = 8$). Bestimmen Sie n^{AA}, n^{BB} und n^{AB}.

(b) Bestimmen Sie die Konfigurationsentropie $S = k \ln g$ für eine solche Anordnung.

(c) Zeigen Sie, daß die freie Energie des Systems für

$$\mathcal{X} = \tanh\left(\frac{q\epsilon}{2kT}\mathcal{X}\right)$$

extremal wird, wobei

$$\epsilon = \frac{\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB}}{2} - \epsilon_{AB}$$

ist.

(d) Skizzieren Sie die grafische Lösung für obige Gleichung und bestimmen Sie die Übergangstemperatur T_c oberhalb der keine Ordnung im Kristall mehr vorhanden ist.

36. **Gleichgewicht von Gas und Festkörper in drei Dimensionen.** In der Vorlesung wurde eine Gleichung für den Gasdruck über einem sublimierenden Festkörper angegeben, jedoch nur für den eindimensionalen Fall. Zeigen Sie, daß für den dreidimensionalen Festkörper im Grenzfall hoher Temperaturen

$$p = \left(\frac{M}{2\pi}\right)^{3/2} \frac{\omega^3}{\tau^{1/2}} \exp(-\epsilon_0/\tau)$$

gilt.

37. **Kritischer Punkt**. Im kritischen Punkt haben die Isothermen im p-V-Diagramm gerade einen Sattelpunkt.

(a) Begründen Sie dies anschaulich anhand einer Skizze für das van der Waals-Gas und berechnen Sie für dieses die kritischen Größen V_c, T_c und p_c.

(b) Gegeben Sei die Zustandsgleichung des sogenannten Dietrici-Gases

$$p = \frac{N\tau}{V - bN} \exp\left(-\frac{aN}{\tau V}\right) \quad .$$

Bestimmen Sie auch hier Druck p_c, Temperatur τ_c und Volumen V_c im kritischen Punkt.