**Toets 3** van de cursus Statistische Fysica Theorie en Experiment, 23/10/2015, 13:15-14:15. Alleen duidelijk leesbaar werk wordt nagekeken; onleesbaar of onnavolgbaar werk wordt beoordeeld als onvoldoende. Motiveer uw antwoorden kort en bondig. Schrijf uw **naam en groep** op elk vel. Calculator, boek, of bundel zijn niet toegestaan; een blauwe of zwarte pen volstaat (s.v.p. geen potlood). Elk van de 10 deelvragen is maximaal 10 punten waard (totaal 100), besteed dus tijd aan elke deelvraag. Succes!

Beschouw een systeem van $N$ deeltjes op vaste posities, bijvoorbeeld in een kristal rooster. De deeltjes kunnen elk in twee toestanden zitten, ofwel in de grondtoestand met energie nul, ofwel in de aangeslagen toestand met energie $\epsilon > 0$. De deeltjes hebben geen onderlinge wisselwerking, en de temperatuur is $T$.

1. Bereken de "1-deeltjes" kanonieke partitiesom $Z_1(T)$, en laat zien dat de $N$-deeltjes kanonieke partitiesom gegeven wordt door $Z(N,T) = Z_1^N(T)$.

2. Bereken de gemiddelde energie $\langle E \rangle$ van het $N$-deeltjes systeem, de warmte capaciteit $C_V$, en de entropie $\langle S \rangle$. Controleer vervolgens dat deze drie grootheden extensief zijn, en plot of schets ze als functie van $kT/\epsilon$.

3. Bereken de variantie van de totale energie $\Delta E \equiv \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle$, en laat zien dat typische relatieve energie fluctuaties $\sqrt{\Delta E}/\langle E \rangle$ schalen als $1/\sqrt{N}$.

We beschouwen nu een gas van $N$ identieke deeltjes in een volume $V$ bij temperatuur $T$. De deeltjes hebben geen onderlinge wisselwerking, en er is geen extern veld, d.w.z. de energie van een microtoestand $(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \cdots, \mathbf{p}_N)$ wordt gegeven door $E = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^2/(2m)$, met $m$ de massa van een deeltje, en $(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$ de positie en impuls van deeltje $i = 1, \cdots, N$. De partitiesom van dit systeem wordt gegeven door

$$Z(N,V,T) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int_V d\mathbf{r}_1 \ldots d\mathbf{r}_N \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{p}_1 \ldots d\mathbf{p}_N \exp[-E/k_B T] \tag{1}$$

4. Kunt u de voorfactor $1/N!$ verklaren?

5. Bereken de partitiesom $Z_1$ voor één deeltje. Druk de partitiesom $Z$ voor $N$ deeltjes uit in termen van $Z_1$.

6. De Helmholtz vrije energie is gedefinieerd als $F(N,V,T) = -k_B T \ln Z(N,V,T)$. Bereken $F$ met behulp van de Stirling formule, en laat zien dat $F$ een extensieve grootheid is.

7. De druk is gedefinieerd als $p = -(\partial F/\partial V)$ bij vaste $N$ en $T$. Bereken $p$. Controleer dat uw resultaat overeenkomt met de ideale gaswet.

We beschouwen een klassiek ideaal gas van $N$ puntdeeltjes in contact met het twee-dimensionale oppervlak van een katalysator.

8. Laat zien dat de chemische potentiaal $\mu$ van het ideale bulk gas (dat is het gas ver weg van het oppervlak) gegeven wordt door

$$\mu = k_B T \ln \frac{Bp}{T^{5/2}} \tag{2}$$

met $T$ de gas temperatuur en $p$ de gas druk. Geef een uitdrukking voor de constante $B$.

Het oppervlak van de katalysator heeft $M$ posities waarop deeltjes kunnen adsorberen. Een positie is ófwel onbezet ófwel bezet door een deeltje. De adsorptie op een positie beïnvloedt de adsorptie op naburige posities níet. Een geadsorbeerd deeltje bevindt zich slechts in één microtoestand met energie $\epsilon$; de onbezette adsorptie-positie heeft een energie gelijk aan nul.

9. Bereken de groot-kanonieke partitie som $\mathcal{Z}_1(T,\mu)$ van een enkele adsorptie-positie in diffusief en thermische evenwicht met het ideale gas op temperatuur $T$ en chemische potentiaal $\mu$.

10. Bereken de kans $P(T,\mu)$ dat op een gegeven adsorptie-plaats een deeltje geadsorbeerd zit.

——— EINDE ————