

## Übungen zu Moderne Theoretischen Physik III SS 16

Prof. Dr. A. Shnirman

Blatt 6

PD Dr. B. Narozhny, P. Schad

Besprechung: Freitag, 27.05.2016

## 1. Maxwell-Boltzmann-Gas: großkanonisches Ensemble (15 Punkte, schriftlich)

Die Hamiltonfunktion eines idealen Gases aus ununterscheidbaren einatomigen Teilchen der Masse  $m$  ist

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}. \quad (1)$$

In dieser Aufgabe soll das großkanonische Ensemble dieses Gases betrachtet werden. (Notation:  $\mathbf{p}_i \equiv \vec{p}_i$ )

- Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme. Drücken Sie das Ergebnis mit der thermischen Wellenlänge  $\lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$  aus.
- Bestimmen Sie das großkanonische Potential  $\Omega(T, V, \mu)$ . Schreiben Sie das totale Differential des großkanonischen Potentials und berechnen Sie die Entropie  $S$ , den Druck  $P$  und die Teilchenzahl  $N$  (als Funktionen von  $T, V, \mu$ ) aus den entsprechenden partiellen Ableitungen von  $\Omega(T, V, \mu)$ .
- Leiten Sie aus den Ergebnissen in (b) die Zustandsgleichung des idealen Gases ab. Finden Sie Ausdrücke für das großkanonische Potential  $\Omega$ , die innere Energie  $U$  und das chemische Potential  $\mu$  als Funktion von  $(T, N, V)$ . Was passiert mit  $\mu$  für  $T \rightarrow 0$  bei vorgegebenem  $N$  und  $V$  und wie ist das zu interpretieren?

## 2. Ising-Modell mit vier Spins

(20 Punkte, schriftlich)

In Ising-Modellen können die Spins, die das magnetische Moment der Atome oder Ionen beschreiben, nur zwei diskrete Zustände annehmen. Das Ising-Modell einer Kette aus vier Spins wird beschrieben durch

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^3 \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \quad (2)$$

Hier können  $\sigma_i^z$  Werte  $\pm 1$  annehmen, was den beiden diskreten Zustände der Spins entspricht. In dieser Aufgabe gibt es kein externes Magnetfeld ( $H = 0$ ).

- Bestimmen Sie die Anzahl der Zustände und die zugehörigen Energien. Was haben Zustände gleicher Energie gemeinsam? Berechnen Sie für  $N = 4$  explizit die Zustandssumme.  
(Hinweis:  $\cosh(3x) = 4 \cosh^3 x - 3 \cosh x$ )
- Berechnen Sie die freie Energie, die Entropie und die Wärmekapazität  $c_H = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_H$ .

### 3. Masselose relativistische Teilchen

(15 Punkte, schriftlich)

Betrachten Sie ein Gas aus  $N$  ununterscheidbaren masselosen relativistischen Teilchen, deren Energie durch

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N c|\mathbf{p}_i| \quad (3)$$

gegeben ist. Das Gas befinde sich in einem dreidimensionalen Volumen  $V$ .

- Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme und die freie Energie  $F$ .
- Bestimmen Sie die Entropie  $S$  und den Druck  $P$  aus der freien Energie.

### 4. Thermodynamik quantenmechanischer Rotations- und Vibrationsfreiheitsgrade eines zweiatomigen Gases

(50 Punkte, mündlich)

In mehratomigen Gasen spielen Rotations- und Vibrationsfreiheitsgrade eine wichtige Rolle. Die Schwerpunktsbewegung und die interne Bewegung der Moleküle können separat betrachtet werden, deshalb faktorisiert die Zustandssumme zu  $Z = Z_{sp}Z_{int}$ , wobei  $Z_{sp}$  den Einfluss der Schwerpunktsbewegung und  $Z_{int}$  den Einfluss der molekülinternen Freiheitsgrade, Rotation und Vibration, beschreibt. Die freie Energie ist dann eine Summe aus Schwerpunktsanteil  $F_{sp}$  und internem Anteil  $F_{int}$ :

$$F = F_{sp} + F_{int}. \quad (4)$$

Der Schwerpunktsanteil wurde im Rahmen des idealen Gases zumindest im klassischen Fall bereits ausführlich behandelt.

In dieser Aufgabe sollen Rotations- und Vibrationsfreiheitsgrade eines Gases von  $N$  zweiatomigen Molekülen quantenmechanisch (in der Ortsdarstellung) beschrieben und der Beitrag zur freien Energie bestimmt werden. Die zweiatomigen Moleküle des Gases setzen sich zusammen aus zwei punktförmigen Atomen mit Masse  $m_1$  und  $m_2 \neq m_1$ , die über ein Potential

$$U(r) = \frac{\mu\omega^2}{2}(r - d)^2 \quad (5)$$

wechselwirken,  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  ist hierbei der Abstand zwischen den beiden Atomen.

- Wie sieht der Hamilton-Operator  $\mathcal{H}_m$  eines einzelnen Moleküls aus? Separieren Sie die Schwerpunktsbewegung und die innere Bewegung des Moleküls, indem Sie  $\mathcal{H}_m$  in Schwerpunktskoordinate  $\mathbf{R}$  und Relativkoordinate  $\mathbf{r}$  ausdrücken.

*Hinweis:* Der Hamilton-Operator hat die Form  $\mathcal{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2(m_1+m_2)} + \mathcal{H}_{int}$ , wobei  $\mathbf{P}$  den Schwerpunktsimpuls beschreibt.

- Stellen Sie eine Schrödingergleichung für die innere Bewegung des Moleküls auf. Führen Sie Kugelkoordinaten ein, machen Sie einen Separationsansatz für die Wellenfunktion und leiten Sie eine Gleichung her, die das radiale Verhalten beschreibt.

- (c) Betrachten Sie jetzt die radiale Schrödingergleichung. Zeigen Sie, dass für die niederenergetischen Energieniveaus,  $\epsilon_{l,n} \ll \mu\omega^2 d^2$  (mit Drehimpulsquantenzahl  $l$  und Vibrationsquantenzahl  $n$ ) die Rotations- und Vibrationsbewegung entkoppelt sind, so dass

$$\epsilon_{l,n} \approx \frac{\hbar l(l+1)}{2I} + \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

Hier ist  $I$  das Trägheitsmoment des Moleküls.

*Hinweis:* Betrachten Sie zunächst den Fall  $l = 0$ .

- (d) Bestimmen Sie mit (6) die kanonische Zustandssumme der internen Freiheitsgrade.
- (e) Was ist der Beitrag der Rotationsfreiheitsgrade zur freien Energie des Systems? Analysieren Sie ihr Ergebnis im Grenzfall hoher ( $T \gg \hbar^2/(2I)$ ) und niedriger ( $T \ll \hbar^2/(2I)$ ) Temperaturen. Berechnen Sie den Rotationsanteil zur Wärmekapazität in beiden Grenzfällen.
- (f) Was ist der Beitrag der Vibrationsfreiheitsgrade zur freien Energie des Systems? Analysieren Sie ihr Ergebnis im Grenzfall hoher ( $T \gg \hbar^2/(2I)$ ) und niedriger ( $T \ll \hbar^2/(2I)$ ) Temperaturen. Berechnen Sie den Vibrationsanteil zur Wärmekapazität in beiden Grenzfällen.

---

Mit „schriftlich“ gekennzeichnete Aufgaben sind handschriftlich zu bearbeiten und bis Mittwoch (vor der Besprechung), 10 Uhr, in den dafür vorgesehenen Kasten einzuwerfen.