UNIVERSITÄT KARLSRUHE SS 2004
INSTITUT FÜR THEORIE DER KONDENSIERTEN MATERIE
Prof. Dr. Peter Wölfle, Dr. Jan Brinckmann **12.05.04**
http://www.tkm.uni-karlsruhe.de/lehre janbri@tkm.uni-karlsruhe.de / Physikhochh. Zi. 10.13

Übungsblatt Nr. 4 zur Theorie F (Statistische Physik)

1 Ideales Gas aus zweiatomigen Molekülen:
Ein Gas aus N Molekülen im Volumen V besitzt Schwingungs-, Rotations- und Translationsfreiheitsgrade. Es ist an ein Wärmebad der Temperatur T angekoppelt (kanonische Gesamtheit).

a) Die Schwingungsenergie *eines* Moleküls ist $E_n^{osz} = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \ldots$.
Wodurch sind die Mikrozustände der Schwingungsbewegung des Gases festgelegt?
Berechnen Sie die Zustandssumme Z^{osz}, die innere Energie U^{osz} und die spez. Wärme c_V^{osz} des Gases. Geben Sie das asymptotische Verhalten von c_V^{osz} an für $T \to 0$ und $T \to \infty$.

b) Die Rotationsenergie eines Moleküls lautet $E_l^{rot} = \frac{\hbar^2}{2I}\, l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \ldots$,
I =Trägheitsmoment. Wie sind die Mikrozustände des Gases festgelegt? (Entartung!)
Geben Sie die Zustandssumme Z^{rot} des Gases an, und berechnen Sie U^{rot} und c_V^{rot} für $T \to 0$ und $T \to \infty$.
Ergebnis: $c_V^{rot}|_{T\to 0} = 3Nk(\beta\hbar^2/I)^2 \exp(-\beta\hbar^2/I)$, $c_V^{rot}|_{T\to\infty} = Nk[\,1 + \frac{1}{45}(\beta\hbar^2/2I)^2\,]$.
Hinweis: $T \to 0$: $\ln(Z)$ in $\exp(-\beta\hbar^2/2I)$ entwickeln.
$T \to \infty$: $\ln(Z)$ in $\beta\hbar^2/2I$ entw., über $\sum_{l=0}^{\infty} f(l) \simeq \int_0^\infty \mathrm{d}x\, f(x) + \frac{f(0)}{2} - \frac{f'(0)}{12} + \frac{f'''(0)}{720}$.

c) Geben Sie U^{trans} und c_V^{trans} der Translationsbewegung an.
Begründen Sie: $c_V = c_V^{osz} + c_V^{rot} + c_V^{trans}$.

2 Modell eines Gummimoleküls:
Ein Polymermolekül bestehe aus N Kettengliedern, die unabhängig voneinander gestreckt ($-$) oder geknickt ($\wedge$) sein können. Knicken eines Gliedes verkleinert die Gesamtlänge L der Kette und kann Energie kosten oder freisetzen. Also ist gegeben:
Energie pro Kettenglied: ε_- bzw. $\varepsilon_\wedge$, Länge eines Gliedes: l_- bzw. $l_\wedge < l_-$.

a) Es wirke die äußere Kraft K entlang der Molekülachse. Bestimmen Sie die Zustandssumme der kanonischen Druckgesamtheit $Z(T,N,K) = \sum_{\text{Zustände }\alpha} e^{-\beta(E_\alpha - K\,L_\alpha)}$.
Hinweis: Entartung der Mikrozustände! Binomischer Satz.

b) Berechnen Sie die freie Enthalpie $G(T,N,K) = -kT\ln(Z)$ und daraus die mittlere Länge L. Welches Vorzeichen hat der thermische Ausdehnungskoeffizient $\alpha = \frac{\partial L}{\partial T}\Big|_{K=0}$ für $\varepsilon_- < \varepsilon_\wedge$ bzw. $\varepsilon_- > \varepsilon_\wedge$?

c) Es sei nun $L = const.$ festgehalten (kanonische Gesamtheit). Bestimmen Sie die Zustandssumme $Z(T,N,L) = \sum_{\bar\alpha} e^{-\beta E_{\bar\alpha}}$ und die freie Energie $F(T,N,L)$.
Hinweis: $L = const.$ ist eine Randbedingung an die Mikrozustände $\bar\alpha$; Stirling-Formel.

d) Berechnen Sie die mittlere Kraft $K(T,N,L)$.
Hinweis: Es gilt $\mathrm{d}U = T\,\mathrm{d}S + K\,\mathrm{d}L \;\Rightarrow\; \mathrm{d}F = \ldots$.

— Besprechung in den Übungsgruppen am Dienstag, 18.05.04 —