

Moderne Theoretische Physik III SS 2015

Prof. Dr. A. Mirlin

Blatt 04, 100 Punkte

Dr. U. Karahasanovic, Dr. I. Protopopov

Besprechung 22.05.2014

Die Abgabe ist jeweils bis spätestens Freitag, 09:30 Uhr in den dafür vorgesehenen Kasten im Eingangsbereich des Physik-Hochhauses zu tätigen.

1. Ideales Gas im Schwerfeld der Erde (15 + 15 = 30 Punkte, mündlich)

Betrachten Sie ein ideales Gas aus N Teilchen der Masse m im Gravitationsfeld der Erde das durch den Hamiltonian

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

beschrieben wird. Nehmen Sie an dass die Erdoberfläche bei $z = 0$ flach sei und für alle Teilchen $z_i > 0$ gelte. Das Gas befinde sich in einem Zylinder beliebiger Höhe und mit Radius R .

- (a) Berechnen Sie die Zustandssumme Z und die freie Energie F des Gases unter der Annahme dass die Temperatur T unabhängig von z ist.
- (b) Bestimmen Sie die Dichte des Gases

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{\prod_{i=1}^N \int d^3p_i d^3r_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(-\beta H)}{\prod_{i=1}^N \int d^3p_i d^3r_i \exp(-\beta H)} \quad (2)$$

sowie den Druck $p(z)$ als Funktion der Höhe z .

2. Klassisches zweiatomiges Gas (5 + 5 + 10 + 5 + 15 = 40 Punkte, schriftlich)

In dieser Aufgabe betrachten wir die thermodynamischen Eigenschaften eines idealen, klassischen, zweiatomigen Gases. Es sei ein Gas von nicht-wechselwirkenden Molekülen gegeben, jedes Molekül besteht aus zwei Atomen (punktartige Objekte mit den Massen m_1 und $m_2 \neq m_1$), die durch ein Potential $U(r)$ wechselwirken ($r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ ist der Abstand der zwei Atome). Unser Ziel ist es die thermodynamischen Eigenschaften der molekularen Freiheitsgrade zu betrachten.

Ein sehr steifes Molekül mit Rotationsfreiheitsgraden

- (a) Betrachten Sie ein steifes Molekül, für dieses gilt

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r = d \\ +\infty, & r \neq d. \end{cases} \quad (3)$$

Das heißt der Abstand der Atome im Molekül ist fest (und gleich d). Die einzigen inneren Freiheitsgrade des Moleküls ergeben sich durch Rotationen. Die Position des Moleküls im Raum ist gänzlich durch den Schwerpunkt $\vec{R} = (m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2)/(m_1 + m_2)$ und die Winkel θ und ϕ gegeben. Hierbei geben die Winkel θ und ϕ die Richtung von $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ an,

$$\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = d(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta), \quad 0 \leq \theta < \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi. \quad (4)$$

Finden sie die Lagrange-Funktion des Moleküls mit den Koordinaten $\vec{R}, \theta, \phi$.

Hinweis: Die Lagrange-Funktion L ist die Differenz der kinetischen und der potentiellen Energie.

- (b) Finden Sie mit Hilfe der Lagrange-Funktion aus Aufgabe 2a die zu den Koordinaten $\vec{R}$, θ und ϕ kanonisch konjugierten Impulse $\vec{P}$, p_θ und p_ϕ . Geben Sie die Hamilton-Funktion $H(R, \theta, \phi, P, p_\theta, p_\phi)$ des Moleküls an.

Hinweis: Der kanonisch konjugierte Impuls p zur Koordinate q ist durch $p = \partial L / \partial \dot{q}$ gegeben.

- (c) Geben Sie die Zustandssumme eines Gases mit N nicht-wechselwirkenden steifen Molekülen bei der Temperatur T an. Zeigen Sie, dass die freie Energie des Gases durch die folgende Summe gegeben ist

$$F = F_{\text{tr}} + F_{\text{rot}}. \quad (5)$$

Hierbei ist

$$F_{\text{tr}} = -Nk_B T \ln \left[\frac{eV}{N} \left(\frac{(m_1 + m_2)T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] \quad (6)$$

der Beitrag durch die Translationsfreiheitsgrade zur freien Energie, wohingegen F_{rot} sich durch die Rotationsfreiheitsgrade ergibt. Berechnen Sie F_{rot} .

Hinweis: Es ist hilfreich das Trägheitsmoment des Moleküls einzuführen, $I = m_1 m_2 d^2 / (m_1 + m_2)$.

- (d) Berechnen Sie die Beiträge der Rotationsfreiheitsgrade zur Entropie des Systems und die Wärmekapazität C_V . Identifizieren Sie die Grenzen der Anwendbarkeit der klassischen Betrachtung der Rotationsfreiheitsgrade.

Moleküle mit endlicher Steifheit und Vibrationen.

- (e) Betrachten Sie nun zusätzlich die Vibrationen der Moleküle. Es ergibt sich nun das Molekülgas mit dem folgenden interatomaren Wechselwirkungspotential [statt (3)]

$$U(r) = \frac{\mu\omega^2}{2}(r-d)^2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (7)$$

Geben Sie die Zustandssumme für ein Gas von N nicht-wechselwirkenden Molekülen mit der Temperatur T an. Zeigen Sie, dass in dem für $\mu\omega^2 d^2 \gg T$ die Fluktuationen der Atomabstände in dem Molekül klein sind und berechnen Sie die freie Energie des System für diesen Grenzfall. Vergleichen Sie das Ergebnis zu dem aus der Aufgabe 2c und identifizieren Sie die Beiträge der molekularen Vibrationen zur freien Energie und zur Wärmekapazität.

3. Maxwell Verteilung und der Druck eines Boltzmann Gases

(15 + 15 = 30 Punkte, mündlich)

Betrachten Sie ein Boltzmann Gas von Teilchen der Masse m im Halbraum $z < 0$. Wir bezeichnen mit T und n die Temperatur und die Konzentration des Gases. Betrachten Sie das Flächenelement dS der Wand (an der Stelle $z = 0$) die das Gas vom leeren Raum für $z > 0$ trennt.

- (a) Finden Sie die durchschnittliche Zahl von Gasteilchen die auf das Flächenelement dS im Zeitintervall dt treffen.
- (b) Jedes Gasteilchen, das die Wand trifft, überträgt auf die Wand den Impuls $2p_z$, wobei p_z die z -Komponente des Teilchenimpulses vor der Kollision ist. Finden Sie den durchschnittlichen Impulstransfer der Teilchen auf das Flächenelement dS während des Zeitintervalls dt . Leiten Sie daraus den Druck des Gases her.