

Moderne Theoretische Physik III SS 2015

Prof. Dr. A. Mirlin

Blatt 05, 100 Punkte

Dr. U. Karahasanovic, Dr. I. Protopopov

Besprechung 29.05.2014

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

1. Quanten Rotation und Vibration in einem zwei atomigen Gas

(5 + 5 + 10 + 10 + 10 = 40 Punkte, schriftlich)

In Blatt 04 wurden die thermodynamischen Eigenschaften eines klassischen, zweiatomigen Gases hergeleitet. Dabei wurde gezeigt, dass sich die freie Energie aus drei Beiträgen zusammensetzt, die von den Translations-, Rotations- und Vibrations-Freiheitsgraden stammen

$$F = F_{\text{trans}} + F_{\text{rot}} + F_{\text{vib}}. \quad (1)$$

In dieser Aufgabe sollen jetzt die Rotation und Vibration des Moleküls quantenmechanisch beschrieben werden. Die Translation soll jedoch weiterhin klassisch behandelt werden.

- (a) Betrachten Sie ein nicht-wechselwirkendes Gas aus Molekülen. Jedes Molekül besteht aus zwei punktförmigen Atomen mit Masse m_1 und $m_2 \neq m_1$, die über das Potential $U(r) = \mu\omega^2(r-d)^2/2$ wechselwirken ($r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ ist hierbei der Abstand zwischen den beiden Atomen). Wie sieht der Hamilton-Operator H eines einzelnen Moleküls aus? Drücken Sie H in Schwerpunktskoordinaten $\vec{R}$ und Relativkoordinaten $\vec{r}$ aus, indem Sie die Schwerpunktsbewegung des Moleküls von den inneren Freiheitsgraden trennen.

Hinweis: Der Hamilton-Operator sollte folgende Form haben

$$H = \frac{P^2}{2(m_1 + m_2)} + H_{\text{int}}. \quad (2)$$

wobei $\vec{P}$ der zu $\vec{R}$ konjugierte Impuls ist.

- (b) Schreiben Sie die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion auf, die die innere Bewegung des Moleküls beschreibt. Drücken Sie die Schrödingergleichung durch Kugel-Kordinaten (r, θ, ϕ) aus und trennen Sie die Variablen. Zeigen Sie, dass die Energie Niveaus des Moleküls $\epsilon_{J,n}$ mit der Drehimpuls-Quantenzahl J und der radialen Quantenzahl n aufgelistet werden können. Was ist der Entartungsgrad der Energieniveaus?

Hinweis: Die Schrödingergleichung beschreibt hier ein Teilchen mit Masse μ , dass sich in einem sphrischen Potential $U(r)$ bewegt.

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

$$\epsilon_{J,n} \approx \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I} + \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad J = 0, 1, \dots; \quad n = 0, 1, \dots \quad (3)$$

Hierbei ist I das Trägheitsmoment des Moleküls.

Hinweis 1: Es ist nützlich zuerst die radiale Schrödingergleichung für $J = 0$ zu betrachten.

Hinweis 2: Die Entkopplung von Rotation und Vibration trat analog bei einem klassischen zwei atomigen Molekül auf Blatt 04 auf.

- (d) Was ist der Beitrag der Rotations-Freiheitsgrade 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 die Rotations-Wärmekapazität in beiden Grenzfällen und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem klassischen Resultat von Blatt 04, Aufgabe 2.
- (e) Was ist der Beitrag der Vibrations-Freiheitsgrade zur freien Energie des Systems? Analysieren Sie ihr Ergebnis im Grenzfall hoher ($T \gg \hbar\omega$) und niedriger ($T \ll \hbar\omega$) Temperaturen. Berechnen Sie die Vibrations-Wärmekapazität in beiden Grenzfällen und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem klassischen Resultat von Blatt 04, Aufgabe 2.

2. Ideales Quantengas im nicht-Gleichgewicht

(15 + 15 + 10 = 40 Punkte, mündlich)

In dieser Aufgabe wird die Entropie eines idealen Quantengas im nicht-Gleichgewicht diskutiert. Dabei soll gezeigt werden, dass die Bose- und Fermi-Verteilungsfunktionen aus dem Prinzip der maximalen Entropie abgeleitet werden können.

Betrachten Sie ein Gas aus nicht-wechselwirkenden Bosonen oder Fermionen, die Einteilchen-zustände besetzen können. Wir wählen ein Energie-Fenster ΔE , so dass ΔE groß im Vergleich zu dem mittleren Energieabstand der Einteilchenzustände, jedoch klein im Vergleich zur Gesamtenergie des Systems ist. Dann kann man Einteilchen-Zustände, deren Energien ϵ_i zwischen $E_j < \epsilon_i < E_j + \Delta E$ liegen, zur Gruppe j zusammenfassen. Jede Gruppe enthält $\nu_j \gg 1$ Einteilchenzustände, die von N_j Teilchen besetzt werden. Ein makroskopischer Zustand des Systems (der im Allgemeinen kein Gleichgewichtszustand ist) kann jetzt durch die Anzahl an Teilchen $N_j \gg 1$ in Gruppe j beschrieben werden, also der Verteilung der Gasteilchen auf die einzelnen Gruppen. Die Entropie des makroskopischen Zustands ist dann durch den Logarithmus der mikroskopischen Realisierungsmöglichkeiten gegeben

$$S = k_B \ln \Delta\Gamma(N_1, N_2, \dots) = k_B \sum_j \ln \Delta\Gamma(N_j) \quad (4)$$

Hier ist $\Delta\Gamma(N_j)$ die Anzahl an Möglichkeiten N_j Teilchen auf die ν_j Zustände in Gruppe j zu verteilen.

- (a) Berechnen Sie $\Delta\Gamma(N)$ für Fermionen. Berechnen Sie mit Gleichung (4) die Entropie und berücksichtigen Sie dabei das $\nu_j, N_j \gg 1$. Drücken Sie ihr Ergebnis in Abhängigkeit von ν_j und der mittleren Teilchenzahl der j . Gruppe, $n_j = N_j/\nu_j$, aus. Diskutieren Sie die Grenzfälle $n_j \ll 1$ und $1 - n_j \ll 1$.
- (b) Berechnen Sie $\Delta\Gamma(N)$ für Bosonen. Berechnen Sie mit Gleichung (4) die Entropie und berücksichtigen Sie dabei das $\nu_j, N_j \gg 1$. Drücken Sie ihr Ergebnis in Abhängigkeit von ν_j und der mittleren Teilchenzahl der j . Gruppe, $n_j = N_j/\nu_j$, aus. Diskutieren Sie die Grenzfälle $n_j \ll 1$ und $n_j \gg 1$.
Hinweis: Sie können das Ergebnis von Blatt 02, Aufgabe 4a nutzen.
- (c) Benutzen Sie das Prinzip "Maximale Entropie" und die Ergebnisse von Aufgabe 2a und 2b um die Fermi- und Bose-Verteilungsfunktionen zu erhalten.
Hinweis: Benutzen Sie den Ansatz der kürzlich in der Vorlesung verwendet wurde um die makrokanonische Verteilung aus der mikrokanonischen zu erhalten ("1. Herleitung").

3. Das ideale Bose-Gas in der Nähe der kritischen Temperatur

(20 Punkte, mündlich)

Betrachten Sie ein ideales Bose-Gas bei Temperaturen T knapp oberhalb der Kondensationstemperatur $T_c(n)$. Die Dichte der Teilchen hängt folgendermaßen von der Temperatur und dem chemischen Potential μ ab (wir verwenden hier die Notation der Vorlesung)

$$n = \frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_T^3}, \quad g_\alpha(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^\alpha}, \quad \lambda_T = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}, \quad z = e^{\mu/k_B T}. \quad (5)$$

We assume the density to be fixed and consider the variation of μ upon variation of temperature. Lösen sie diese Gleichung für $T \gtrsim T_c(n)$ nach μ auf und zeigen Sie, dass das chemische Potential mit $(T - T_c(n))^2$ verschwindet.

Hinweis: Show that for $0 < 1 - z \ll 1$

$$g_{3/2}(z) = g_{3/2}(1) - 2\sqrt{\pi(1-z)}. \quad (6)$$