Fakultät für Physik
Prof. Christian Back, Prof. Milena Grifoni

WS 12/13

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik

Blatt 6

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040) (theory, Tue 12h-14h c.t., Phy 7.3.14)
Sebastian Putz (4.1.36, phone 2032) (experiment, Thu 10h-12h c.t., Phy 7.3.14)

Part I: Theory

6.1 Ultrarelativistic Boltzmann gas

We consider an ideal Boltzmann gas of indistinguishable particles in the extreme ultrarelativistic limit, in which the energy E of a particle is related to its momentum $\vec{p}$ by $E = c|\vec{p}|$, where c is the velocity of light. The gas is confined to a region of volume V and is in contact with a thermal bath at temperature T.

1. For a *single* particle, find the partition function $z(T, V)$ in the classical phase space spanned by position and momentum. (2 points)

2. Generalize this result to the canonical partition function $Z(T, V, N)$ for N particles. (1 point)

3. Derive the free energy F, the internal energy E and the equation of state (pressure P) and compare with the nonrelativistic ideal gas. (2 points)

6.2 Thermal wavelength of some ideal quantum gases

1. Treating all particles as free particles, give numerical estimates for the thermal wavelength λ of
(i) electrons in a typical metal,
(ii) He^3 atoms in liquid He^3 (atomic volume is 46.2Å^3/atom),
(iii) rubidium atoms (assume 10^5 in a 1.5 cm diameter sphere). (2 points)

2. For all these types of particles plot λ^3 as a function of temperature, $\lambda^3(T)$. In what temperature ranges can these particles be treated as a dilute gas ($d \ll v$), and when as a classical gas ($\lambda^3 \ll v$)? Here d is the size of the particle and $v = V/N = 1/n$ is the volume per particle. (2 points)

6.3 Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac and Bose-Einstein statistics

Consider a system consisting of two particles, each of which can be in one of three quantum states of respective energies 0, ϵ and 3ϵ. The system is in contact with a heat reservoir at temperature $T = 1/k_B\beta$.

1. Write an expression for the partition function Z if the particles obey classical Maxwell-Boltzmann statistics and are considered distinguishable. (1 point)

2. What is Z if they obey Fermi-Dirac statistics? (1 point)

3. What is Z if they obey Bose-Einstein statistics? (1 point)

Part II: Experiment

6.4 Zweiatomige Molekül

Betrachen Sie ein Gas aus N zweiatomigen Molekülen ohne gegenseitige Wechselwirkung in einem festen Volumen V. Die Wechselwirkung der beiden Atome eines Moleküls werde durch ein harmonisches Potential um den Gleichgewichtsabstand a beschrieben, d. h. die Hamiltonfunktion sei

$$h(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2) = \frac{|\vec{p}_1|^2}{2m_1} + \frac{|\vec{p}_2|^2}{2m_2} + \frac{C}{2}(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2| - a)^2.$$

Betrachen Sie das Gas klassisch und unterscheiden Sie die beiden Fälle $a = 0$ und $a > 0$. Welcher von beiden beschreibt ein Molekül sinnvoller?

1. Berechnen Sie für beide Fälle die kanonische Zustandssumme, wobei Sie im Fall $a > 0$ den Fall starker Federkonstante bzw. kleiner Temperatur betrachten können, d. h. die Näherung $a \gg \sqrt{kT/C}$ verwenden können. Benutzen Sie dann in diesem Fall, dass Sie ein Integral mit unterer Grenze $-a$ durch ein Integral mit unterer Grenze $-\infty$ nähern konnen. **Hinweis**: Es ist nützlich, die Hamiltonfunktion zunächst als Funktion des Schwerpunktvektors und des Differenzvektors zwischen den beiden Atomen zu schreiben. (2 Punkte)

2. Berechnen Sie jeweils die frei Energie. (1 Punkt)

3. Berechnen Sie jeweils die Entropie und den Erwartungswert der Energie. (1 Punkt)

4. Berechnen Sie jeweils die spezifische Wärme C_V. (1 Punkt)

5. Interpretieren Sie das letzte Resultat im Sinne des Gleichverteilungssatzes und zählen Sie die relevanten (welche?) thermodynamischen Freiheitsgrade des Moleküls. (1 Punkt)

6.5 Modell des linearen Ionenkristalls (Teil 3 in der Übung)

1. Berechnen Sie die Madelungkonstante α einer linearen Ionenkette mit einfach negativ bzw. positiv geladenen Ionen, bezogen auf die Gitterkonstante a. Wie groß ist die Madelungkonstante, wenn sie auf den Abstand R nächster Nachbarn bezogen wird? (2 Punkte)

2. Betrachten Sie eine Kette aus $2N$ Ionen mit den Ladungen $\pm e$ und dem abstoßenden Potential Ar^{-n} zwischen nächsten Nachbarn. Zeigen Sie, dass für die innere Energie U im Gleichgewichtsabstand $r = r_0$ gilt

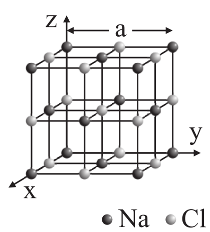
   $$U(r_0) = -\frac{Ne^2}{2\pi\epsilon_0 r_0}\left(1 - \frac{1}{n}\right)\ln 2.$$

   Für welche n wäre der Kristall stabil? (1 Punkt)

3. Welche Schwierigkeiten ergeben sich für die Berechnung der Madelung-Konstante im dreidimensionalen Kristall?

6.6 NaCl-Kristall

NaCl kristallisiert in der kubisch flächenzentrierten Geometrie mit einer Gitterkonstante von $a = 5.44$ Å. Neben der Coulombanziehung enthält das Gitterpotential einen abstoßenden Term $\propto b \cdot r^{-\beta}$ mit $\beta = 8.9$. Die Madelungkonstante des NaCl-Gitters ist $\alpha = 1.748$.



1. Berückichtigen Sie für die repulsive Wechselwirkung nur nächste Nachbarn und bestimmen Sie die Konstante b. (2 Punkte)

2. Wie groß ist in diesem Fall die Bindungsenergie pro NaCl Molekül? (1 Punkt)