8. Übung

Ihre Lösung ist bis zum 13.12.2017 um 12 Uhr in das Postfach von Prof. Dr. Heiko Rieger im Erdgeschoss von Gebäude E2 6 einzuwerfen.

1. [*9 Punkte*] **Gittergas - Mean-Field-Modell**

Betrachten Sie Teilchen, die sich auf einem Gitter mit M Gitterplätzen befinden. Jeder Gitterplatz kann von höchstens einem Teilchen besetzt sein. Das System wird durch

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij} n_i n_j$$

beschrieben mit $n_i = 0, 1$ ($n_i = 1$: 1 Teilchen am Gitterplatz i, $n_j = 0$ kein Teilchen am Gitterplatz j), $n = \sum_{i=1}^{M} n_i$ die Gesamtteilchenzahl und J_{ij} die Wechselwirkungsstärke zwischen Teilchen auf benachbarten Gitterplätzen. Im Mean-Field-Modell ersetzen wir J_{ij} durch eine gemittelte Wechselwirkungsstärke $J_{ij} = \frac{J}{M}$ für alle $i, j = 1, \ldots, M$.

$\boxed{2}$ (a) Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme $Z^{(gk)}(M, \mu)$ im Limes $M \to \infty$.

   i. Zeigen Sie zunächst, dass $Z^{(gk)} = c \cdot \int dn \, \exp(-M \cdot g(n))$, mit $g(n) = \beta \cdot J \cdot \frac{n^2}{2} - \ln\left(1 + e^{\beta \cdot (J \cdot n + \mu)}\right)$.
   Hinweis: Hubbard-Stratonovich-Transformation

   ii. Berechnen Sie $Z^{(gk)}$ durch Sattelpunktintegration.
   Hinweis: $Z^{(gk)} = c \cdot \exp(-M \cdot g(n_0))$ mit n_0 absolutes Minimum von g

$\boxed{1}$ (b) Zeigen Sie, dass das großkanonische Potential pro Teilchen proportional zu $g(n_0)$ ist und dass $n_0 = \left\langle \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} n_i \right\rangle$ der Erwartungswert der Teilchendichte (= Anzahl Teilchen pro Gitterplatz) ist.

$\boxed{1}$ (c) Zeigen Sie, dass für $\mu = -\frac{J}{2}$ die Teilchendichte durch $n_0 = \frac{1}{2}$ gegeben ist.

$\boxed{2}$ (d) Es seien $\mu_c := -\frac{J}{2}$, $n_c := \frac{1}{2}$, und $\Delta\mu := \mu - \mu_c$, $\Delta n := n - n_c$.

   i. Zeigen Sie, dass die Sattelpunktgleichgung $g'(n) = 0$ geschrieben werden kann als $\Delta n = \frac{1}{2} \tanh\left\{\frac{\beta}{2}(J\Delta n + \Delta\mu)\right\}$.

   ii. Drücken Sie das großkanonische Potential als Funktion von Δn und $\Delta\mu$ aus.

$\boxed{1}$ (e) Zeigen Sie, dass die kritische Temperatur $T_c = \frac{J}{4k_B}$ ist.
Skizzieren Sie g als Funktion von Δn

   i. für $T > T_c$ für die Fälle $\Delta\mu < 0, = 0, > 0$

   ii. für $T < T_c$ für die Fälle $\Delta\mu < 0, = 0, > 0$

   einmal für $|\Delta\mu| \ll J$, einmal für $|\Delta\mu| \gg J$.

   iii. Diskutieren Sie in i. und ii. die Bedeutung der einzelnen Extrema sowie die Bedeutung der Wendepunkte.

$\boxed{1}$ (f) i. Skizzieren Sie für $\Delta\mu = 0$ den Verlauf von Δn als Funktion von T.

   ii. Skizzieren Sie den Verlauf von Δn als Funktion von $\Delta\mu$ für $T > T_c$, $T = T_c$ und $T < T_c$.

$\boxed{1}$ (g) Sei $\frac{|T - T_c|}{T_c} \ll 1$, $\frac{|\mu - \mu_c|}{\mu_c} \ll 1$.
Zeigen Sie

   i. für $T < T_c$ und $\mu = -\frac{J}{2}$: $n - n_c \propto (T_c - T)^{\frac{1}{2}}$,

   ii. für $T = T_c$: $n - n_c \propto (\mu - \mu_c)^{\frac{1}{3}}$,

   iii. für $\mu = \mu_c$: $\frac{\partial n}{\partial \mu} \propto |T - T_c|^{-1}$,

   iv. für $\mu = \mu_c$, dass $\frac{\partial g}{\partial T}$ bei $T = T_c$ springt (d. h. Sprung in der spezifischen Wärme).

2. [*5 Punkte*] **Quantenstatistiken für Teilchen**

$\boxed{2}$ (a) Betrachten Sie drei freie, unterscheidbare Teilchen in einem Kasten. Die Teilchen befinden sich in Energieeigenzuständen zu den Wellenzahlen k_1, k_2 und k_3.

i. Schreiben Sie alle 3-Teilchenzustände auf.

ii. Die Teilchen seien Bosonen. Schreiben Sie alle physikalischen 3-Teilchenzustände auf. Wie sieht es für $k_1 = k_2 \neq k_3$ aus? Wie für $k_1 = k_2 = k_3$?

iii. Die Teilchen seien Fermionen. Schreiben Sie wieder alle physikalischen 3-Teilchenzustände auf. Wie viele gibt es, wenn $k_i = k_j$ für ein Paar i, j?

$\boxed{3}$ (b) Betrachten Sie ein Gas aus nur zwei Teilchen. Jedes Teilchen kann in nur drei möglichen Quantenzuständen $s = 1, 2, 3$ sein.

i. Berechnen Sie für die Maxwell-Boltzmann-Statistik, die Bose-Einstein-Statistik und die Fermi-Dirac-Statistik jeweils das Verhältnis aus p_s und p_d, wobei p_s die Wahrscheinlichkeit, die beiden Teilchen im gleichen Zustand zu finden, und p_d die Wahrscheinlichkeit, die beiden Teilchen in unterschiedlichen Zuständen zu finden, bezeichnet.

ii. Wie erklären sich diese Wahrscheinlichkeiten aus der Form der Wellenfunktion des (2-Teilchen-)Gases? Beachten Sie, dass die Teilchen nicht wechselwirken.

3. [*3 Punkte*] **Innere Freiheitsgrade**

Betrachten Sie ein klassisches ideales Gas aus Teilchen mit inneren Freiheitsgraden.

$\boxed{2}$ (a) Die Hamilton-Funktion für einen Schwingungsfreiheitsgrad eines Teilchens sei $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kq^2}{2}$, wobei q eine innere Koordinate des Teilchens ist (Ausdehnung um Ruhekonfiguration) und k eine Konstante. Berechnen Sie die mittlere Schwingungsenergie $\overline{E}_{vib}$.

$\boxed{1}$ (b) Welches Ergebnis ist für die mittlere Rotationsenergie $\overline{E}_{rot}$ bei einem inneren Rotationsfreiheitsgrad des Teilchens zu erwarten?

4. [*3 Punkte*] **Spezifische Wärme 3-atomiger Moleküle**

Skizzieren Sie die spezifische Wärme C von

$\boxed{1.5}$ (a) Wasser

$\boxed{1.5}$ (b) Kohlenstoffdioxid

in Einheiten von $k_B T$ als Funktion der Temperatur T. Gehen Sie dabei auch auf den Fall derart hoher Temperaturen ein, dass die Moleküle dissoziiert sind.

Hinweis: Die Anregungsenergie der Rotationsfreiheitsgrade ist geringer als die der Schwingungsfreiheitsgrade.

Dr. Adam Wysocki, Gebäude E2 6, Raum 4.26, a.wysocki@lusi.uni-sb.de