

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik Blatt 6

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040)
Dr. Christoph Lange (2.0.07, phone 5704)

(Theorie, Thu 8:30h - 12h, Phy 2.1.29)
(Experiment, Fr 12:30h - 14:00h, Phy 2.1.29)

Part I: Theory

In this Sheet we address the statistical properties of a more complex system: an ideal gas of diatomic molecules. The impact of the internal degrees of freedom of the gas molecules on the thermodynamical properties of the entire system will be analyzed. A useful reference is, for example, the Chapter 27 of the textbook Statistische Physik by T. Fließbach.

6.1 Partition function of a diatomic ideal gas

Consider N particles of a diatomic ideal gas in a volume V .

a) Prove that the canonical partition function can be written as the product of the three components,

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_{\text{trans}} \exp(-\beta E_{\text{trans}}) \sum_{\text{vib}} \exp(-\beta E_{\text{vib}}) \sum_{\text{rot}} \exp(-\beta E_{\text{rot}})$$

b) For the case of H_2 , estimate the energy spacing of the translational, vibrational and rotational components of the single molecular energy. Assume as volume a cube of lateral size $L = 0.1$ m. Deduce at which temperatures a quantum mechanical treatment of the different degrees of freedom is necessary. Hint: Assume the equilibrium distance between the Hydrogen atoms to be $R_0 = 2a_B \approx 1.06$ Å and a zero point fluctuation $\Delta\xi \approx 0.2R_0$.

c) Which of the degrees of freedom of the diatomic gas contributes to its pressure? Explain the result.

(3 Points)

6.2 Heat capacity of a diatomic ideal gas

Starting from the partition functions introduced in the previous exercise, calculate the translational, vibrational and rotational contributions to the heat capacity of a gas of diatomic molecules. Finally derive, for the vibrational part, the leading temperature dependence for high and low temperatures $T \ll T_{\text{vib}}$ and $T \gg T_{\text{vib}}$, respectively. T_{vib} is the vibronic level spacing.

(4 Points)

6.3 Ortho- and para-Hydrogen (in class)

Read the last section of the chapter 27 of the book Statistische Physik by T. Fließbach and illustrate the differences in the thermodynamical properties of ortho- and para-Hydrogen.

6.4 Rotational component of the partition function of H_2 , D_2 and HD

Consider three different type of gases, containing H_2 , D_2 and HD molecules. Write their rotational

partition function taking into account the symmetry under exchange of the two atoms. Which relation $\eta(T_0)$ does one obtain for even and odd quantum numbers l if one stores the gases for long enough time at the temperature $T_0 \gg T_{\text{rot}}$? Calculate the specific heat c_{rot} of these samples for temperatures $T \ll T_{\text{rot}}$.

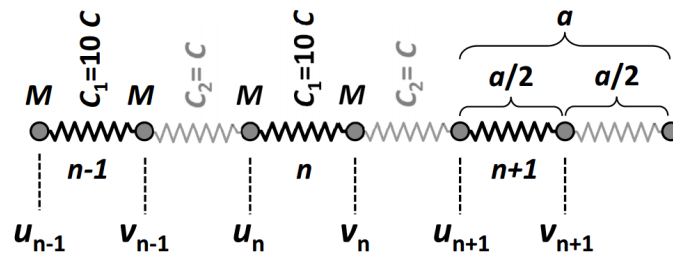
Hint: D is deuterium, a Hydrogen atom with a deuteron (proton + neutron) as nucleus. The deuteron has spin 1; in D_2 these spins can combine to $S = 0, 1$ and 2 .

(4 Points)

Part II: Experiment

6.5 Lineare Kette aus zweiatomigen Molekülen

Untersuchen Sie die Grundschrwingungen einer linearen Kette aus zweiatomigen Molekülen, die aus gleichen Atomen der Masse M bestehen. Der Abstand der Atome im Molekül und der Abstand zwischen den Molekülen soll gleich sein und $a/2$ betragen (siehe Abbildung). Die Kraftkonstanten zwischen den Atomen desselben Moleküls soll $C_1 = 10C$ und zwischen Atomen zweier benachbarter Moleküle $C_2 = C$ betragen. Die Kopplung mit übernächsten Nachbarn soll vernachlässigt werden. Wir erhalten so eine lineare Kette aus Atomen mit Masse M und Abstand $a/2$, bei der die Federkonstante zwischen den einzelnen Atomen abwechselnd groß und klein ist. Diese Anordnung stellt ein einfaches Modell für einen Kristall aus zweiatomigen Molekülen wie z.B. H_2 dar.



Bestimmen Sie $\omega(q)$ bei $q = 0$ und $q = \pi/a$. Diskutieren Sie die Dispersionsrelation anhand einer Skizze. (3 Punkte)

6.6 Lineare Kette mit Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn

Betrachten Sie eine lineare Kette aus identischen Atomen bei den Positionen $x_p = pa$ mit $p = 1, 2, 3, \dots$. Die Wechselwirkung sei quasi-harmonisch. Die Kopplungskonstante zwischen übernächsten Nachbarn sei $1/\nu$ -mal so groß ($\nu = 2, 3, \dots$) wie die Kopplungskonstante zwischen den nächsten Nachbarn. Zwischen weiter voneinander entfernten Atomen sei sie Null.

- Bestimmen Sie die Dispersionsrelation $\omega(q)$ und skizzieren Sie diese. (1 Punkt)
- Für welche ganzzahligen Werte ν liegt das Maximum in der Dispersionsrelation bei Wellenzahlen $q < \pi/a$? (1 Punkt)
- Wie groß ist die maximale Frequenz einer ungedämpften Welle? Diskutieren Sie insbesondere den Fall $\nu = 2$. (1 Punkt)
- Wie groß ist die Schallgeschwindigkeit? (1 Punkt)

6.7 Periodische Randbedingungen für ebenes quadratisches Gitter

Betrachten Sie ein endliches ebenes quadratisches Gitter mit der Gitterkonstanten a , bestehend aus $N = 6 \cdot 6 = 36$ Atomen.

- Was sind, unter Annahme von periodischen Randbedingungen, die erlaubten Werte für die Wellenvektoren $\vec{k} = (k_x, k_y)$ von Phononen? Zeichnen Sie die erlaubten Werte in der k_x - k_y -Ebene. (1 Punkt)
- Tragen Sie in der Zeichnung die Grenze der ersten Brillouinzone ein – unter der Annahme von periodischen Randbedingungen. Wie ändert sich die Grenze der Brillouinzone, wenn das Gitter aus 100 Atomen mit gleicher Gitterkonstanten a besteht? (1 Punkt)

6.8 Singularität in der Zustandsdichte für Phononen

Die Dispersionsrelation einer linearen Kette mit ausschließlicher nächster-Nachbar Wechselwirkung lautet

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{4C_1}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|,$$

wobei M die Massen der Atome sind und C_1 die relevante Federkonstante. Verwenden Sie periodische Randbedingungen für eine endliche Kette der Länge $L = N \cdot a$ mit $N \gg 1$ Atomen und zeigen Sie, dass die Zustandsdichte $D(\omega)$ der akustischen Phononen eine Singularität bei der Maximalfrequenz der Phononen hat. (1 Punkt)

6.9 Unstetigkeit in der Zustandsdichte optischer Phononen

Angenommen, ein optischer Phononenast habe im Dreidimensionalen nahe $k = 0$ die Form $\omega(k) = \omega_0 - Ak^2$. Berechnen Sie für $\omega < \omega_0$ die Zustandsdichte $D(\omega)$ und diskutieren Sie das Verhalten von $D(\omega)$ bei $\omega = \omega_0$. (1 Punkt)