Thermodynamik und Statistische Physik
Lösung Übung 12 WS 12-13

Sven Buder

08. Februar 2013

Aufgabe 34 (Nachtrag)

$$\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z(\beta, V, \alpha) = \left\langle \hat{H}^2 \right\rangle - \left\langle \hat{H} \right\rangle^2 \tag{1}$$

$$\ln Z = \mp \sum_i \ln\left(1 \mp e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)}\right) \tag{2}$$

$$\text{mit } \alpha = -\beta\mu \Rightarrow \ln Z = \mp \sum_i \ln\left(1 \mp e^{-\alpha - \beta\varepsilon_i}\right) \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\sum_i \frac{\varepsilon_i e^{-\alpha-\beta\varepsilon_i}}{1 \mp e^{-\alpha-\beta\varepsilon_i}} = -\sum_i \frac{\varepsilon_i}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_i} \mp 1} \tag{4}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z = \sum_i \frac{\varepsilon_i \varepsilon_i e^{\alpha+\beta\varepsilon_i}}{\left(1 \mp e^{\alpha+\beta\varepsilon_i}\right)^2} = \sum_i \left(\frac{\varepsilon_i}{e^{(\alpha+\beta\varepsilon_i)/2} \mp e^{-(\alpha+\beta\varepsilon_i)/2}}\right)^2 \tag{5}$$

$$= \sum_i \left[\frac{\varepsilon_i}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)/2} \mp e^{-\beta(\varepsilon_i-\mu)/2}}\right]^2 \tag{6}$$

Aufgabe 37

relativistisches (klassisches) ideales Gas

N Teilchen, Ruhemasse $m_0 = 0$, Spin L, Kasten V

ges.: thermische und kalorische Zustandsgleichung

kanonische Verteilung

$$H = H(q_i, p_i, s) = \sum_{i=1}^{n} h_i = \sum_{i=1}^{n} c|\vec{p_i}| \qquad \text{mit} \qquad h_i = c|\vec{p_i}| \tag{7}$$

(denn allgemein: $h = \sqrt{c^2\vec{p}^2 + (m_0 c^2)^2} \quad \overset{m_0 \to 0}{\to} \quad c|\vec{p}|$)

Zustandssumme Z

$$Z = \sum_{s=-L}^{L} \int \int e^{-\beta H(q_i, p_i, s)} d\omega \tag{8}$$

mit s. . . Spinvariable, $\quad d\omega = \frac{1}{N! h^{3N}} \prod_{i=1}^{3N} dq_i dp_i$

$\rightarrow$ Interpretation über das Volumen (h_i hängt nicht von s ab)

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} V^N (2s+1)^N \underbrace{\int \exp\left[-\beta \sum_{i=1}^{3N} h_i\right] \prod_{i=1}^{3N} dp_i} \tag{9}$$

$$= \frac{1}{N!h^{3N}} V^N (2s+1)^N \left(\int e^{-\beta c |\vec{p_i}|} dp_1 dp_2 dp_3 \right)^N \tag{10}$$

d.h. noch zu berechnen:

$$I = \int e^{-\beta cp} dp_1 dp_2 dp_3 \qquad \text{mit} \qquad p = |\vec{p}| = \sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2} \tag{11}$$

mit Koordinatentransformation zu Kugelkoordinaten:

$$dp_1 dp_2 dp_3 \qquad \longrightarrow \qquad p^2 \sin\vartheta dp d\vartheta d\varphi$$

$$I = 4\pi \int_0^\infty e^{-\beta cp} p2dp = \frac{8\pi}{(\beta c)^3} \tag{12}$$

$$\left(\text{mit} \qquad \int_0^\infty p^2 e^{-ap} dp = \frac{d^2}{da^2} \int_0^\infty e^{-ap} dp \right) \tag{13}$$

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} V^N (2L+1)^N \left(\frac{8\pi}{(\beta c)^3} \right)^2 = aV^N \tag{14}$$

Für eine kanonische Verteilung brauchen wir nun die Freie Energie F; Gesucht war die therm. ZGL. $p = p(T, V, N)$. . .

$$F = -k_B T \ln Z \tag{15}$$

$$F = U - TS \tag{16}$$

$$dF = dU - TdS - SdT \tag{17}$$

Mit der Gibbsschen Fundamentalgleichung $TdS = dU + pdV$ folgt

$$dF = -pdV - sdT \tag{18}$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{V,N} \tag{19}$$

$$\overset{Gl.15}{=} k_B T \frac{\partial}{\partial V} \ln Z = k_B T \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial V} Z \tag{20}$$

$$\text{mit} \qquad \ln Z \overset{Gl.14}{=} \ln\left(aV^N\right) = \cancel{\ln a} + N \ln V \tag{21}$$

$$\Rightarrow \qquad p = k_B T \frac{\partial}{\partial V}(N \ln V) = \frac{k_B T N}{V} \tag{22}$$

$$\Rightarrow \qquad \boxed{pV = N k_B T} \qquad \ldots \text{thermische Zustandsgleichung} \tag{23}$$

Berechnung auch möglich über: $k_B T \frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial V} Z = k_B T \frac{1}{V^N} V^{N-1} = \frac{k_B T N}{V}$

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z - \frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} \tag{24}$$

$$\ln Z = \ln\left(b \cdot \frac{1}{\beta^{3N}}\right) = \ln b - 3N \ln \beta \tag{25}$$

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = +3N \frac{1}{\beta} = 3N k_B T \tag{26}$$

$$\Rightarrow \qquad \boxed{U = 3N k_B T} \qquad \ldots \text{kalorische Zustandsgleichung} \tag{27}$$

$$C_V = \left(\frac{\partial Q}{\partial T}\right)_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 3N k_B T \tag{28}$$

Aufgabe 38

$$F(T, V, N) = J + \mu N \tag{29}$$

mit μ aus $N = -\left(\frac{\partial J}{\partial \mu}\right)_{T,V}$ (Zusammenhang von F und J über Legendre-Transformation)

Ansatz: μ in Gl. 29 ersetzen (siehe Vorlesung bei Sommerfeld-Entwicklung)

$$\vartheta = \beta\mu = \frac{\mu}{k_B T} = \left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}} - \frac{\pi^2}{12\left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}}} - \frac{\pi^4}{80\left(l^3 n_f\right)^2} + \ldots \tag{30}$$

Reihenentwicklung für das großkanonische Potential liefert

$$J = -k_B T N \left[\frac{2}{5}\left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}} - \frac{\pi^2}{6\left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}}} - \frac{\pi^4}{40\left(l^3 n_f\right)^2} + \ldots\right] \tag{31}$$

$$\overset{Gl.30}{\Rightarrow} \qquad \mu = k_B T \left[\left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}} - \frac{\pi^2}{12\left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}}} + \ldots\right] \tag{32}$$

Einsetzen von Gl. 31 in Gl. 29 liefert

$$F = k_B T N \left[\frac{3}{5}\left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}} - \frac{\pi^2}{4\left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}}} + \frac{\pi^4}{80\left(l^3 n_f\right)^2} + \ldots\right] \tag{33}$$

Aufgabe 39

Natrium mit $n_e = \frac{N}{V} = 2{,}50\,10^{22}\frac{1}{\mathrm{cm}^3} = 2{,}5\,10^{28}\frac{1}{\mathrm{m}^3}$

a) Fermi-Energie

$$\varepsilon_F = \left(3\pi^2\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} = 4{,}9951 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{J} \tag{34}$$

a) Fermi-Geschwindigkeit

$$v_F = \sqrt{\frac{2\varepsilon_F}{m_e}} \approx 1{,}05 \cdot 10^6\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \tag{35}$$

c) Fermi-Temperatur

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} \approx 3{,}62 \cdot 10^4\,\mathrm{K} \tag{36}$$

d)

Es gilt für die Elektronen:

$$\varepsilon_F = \left(3\pi^2\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}, \qquad n_f = \frac{N}{V} \tag{37}$$

$$\frac{1}{l^3} = \frac{4\pi g}{3} \frac{(2m_e k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}, \qquad g = 2, \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} \tag{38}$$

$$\Rightarrow \qquad \left(l^3\right)^{\frac{2}{3}} = \left[\frac{3h^2}{8\pi}\right]^{\frac{2}{3}} \frac{1}{2m_e k_B T} \tag{39}$$

$$\overset{Gl.37}{\Rightarrow} (n_f)^{\frac{2}{3}} = \frac{2\varepsilon_F m_e}{\left(3\pi^2\right)^{\frac{2}{3}} \hbar^2} = \frac{2\varepsilon_F m_c}{\left(3\pi^2\hbar^3\right)^{\frac{2}{3}}} \tag{40}$$

$$\left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}} = \frac{\varepsilon_F}{k_B T} \tag{41}$$

Erinnern uns an Gl. 30

$$\vartheta = \left(l^3 n_f\right)^{\frac{2}{3}} - \dots = \beta\mu \tag{42}$$

und setzen Gl. 41 ein:

$$\vartheta = \frac{\varepsilon_F}{k_B T}\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 - \frac{\pi^4}{80}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^4 + \dots\right] \tag{43}$$

mit $\frac{k_B T}{\varepsilon_F} = 0{,}001231 \ll 1$ für $\varepsilon_F \approx 7\,\mathrm{eV}$ und $T = 100\,\mathrm{K}$

$$\vartheta = \frac{\varepsilon_F}{k_B T} + \mathcal{O}\left(10^{-6}\right) \tag{44}$$

$$\vartheta_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B T} \approx \frac{\mu}{k_B T} = 812{,}311 \tag{45}$$

In der Vorlesung wurde außerdem besprochen:

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \nu(\varepsilon) \bar{n}(\varepsilon) \tag{46}$$

$$\text{mit} \qquad \bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \tag{47}$$

$$\text{sowie} \qquad \nu(\varepsilon) = \xi \varepsilon^{\frac{1}{2}}, \qquad \xi = \left(\frac{m_e^3}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{gV}{?} \tag{48}$$

Wir wollten a (Prozentzahl der Teilchen mit $\varepsilon < \varepsilon_F$) berechnen:

$$a = \frac{\int_0^{\varepsilon_F} \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}}{\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}} = \frac{\int_0^{\vartheta_F} \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{e^{\beta(x-\vartheta_F)}+1}}{\int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{e^{\beta(x-\vartheta_F)}+1}} \tag{49}$$

nach Substitution mit $x = \beta\varepsilon$, $\varepsilon = \frac{1}{\beta}x$, $d\varepsilon = \frac{1}{\beta}dx = k_B T dx$ mit $\varepsilon \in [0, \varepsilon_F]$ und $x \in \left[0, \frac{\varepsilon_F}{k_B T}\right] = [0, \vartheta_F]$

Eine numerische Auswertung ergibt: $a = 0{,}99872 \qquad \Rightarrow \qquad 1 - a = 0{,}00128$

D.h. nur 0,128 % haben kinetische Energie oberhalb von ε_F.

Zur Sommerfeld-Entwicklung

Wir brauchen: $F_{\frac{\alpha}{2}}$ bzw. $F_\varphi(\vartheta)$
Für große Argumente gilt dann:

$$F_{\frac{1}{2}}(\vartheta) = 1 + \frac{\pi^2}{8}\frac{1}{\vartheta^2} + \ldots \tag{50}$$

$$F_{\frac{3}{2}}(\vartheta) = 1 + \frac{5\pi^2}{8}\frac{1}{\vartheta^2} + \ldots \tag{51}$$

$$\tag{52}$$

Für die mittlere Teilchenzahl ergibt sich dann:

$$N = \xi \frac{2\mu^{\frac{3}{2}}}{3} F_{\frac{1}{2}}(\vartheta) = \frac{V}{l^3} F_{\frac{1}{2}}(\vartheta) \tag{53}$$