Lectures:

30.11. Recapitulation. Rotational and vibrational degrees of freedom.
2.12. Debye model. Blackbody radiation.

Book: Schwabl 4.5, 4.6, 5.1

Reading see website: „Thermodynamics and Quanta in Planck's Work"

Excercises: Please hand in until Mo 6.12.2021, 8:00 (10 points each):.

11.) Consider a general single particle partition functions over quantized energies $Z_1 = \sum_r e^{-\beta\varepsilon_r}$.

a) Assume that $e^{-\beta\varepsilon_0} \gg e^{-\beta\varepsilon_1} \gg e^{-\beta\varepsilon_2}$ for the ground state energy and the first two excited energies. In what temperature regime is this condition fulfilled? Calculate Z_1 neglecting $e^{-\beta\varepsilon_2}$ and higher terms and assuming that the degeneracy for the ground state and the first excited energy are given by g_0 and g_1, respectively. What are the energy expectation and the specific heat as a function of energy?

b) Apply the result to the quantized kinetic energy of independent particles in a (hypothetical) 3D box of $V=L^3=1\text{nm}^3$. What is the valid temperature range for the low-T approximation from a) of He-atoms and electrons in such a box respectively?

c) For *large* temperatures use the resummation formula $\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\pi\alpha n^2} = \sqrt{\frac{1}{\alpha}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\pi m^2/\alpha}$ in order to determine the first order correction of the single particle partition function, the energy, and the specific heat as a function of T (relative to the ideal gas). Plot the results for the specific heat for large T together with the result from a) in suitable units. Is there evidence for a maximum in the specific heat?

12) Consider general wave-excitations with a dispersion relations $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|^\gamma$, which can propagate in d-dimensions ($d = 1,2,3$) with wave-vector ***k.***

a) Determine the density of states $g(\omega)$ for each of the dimensions $d = 1,2,3$ and arbitrary $\gamma>0$.

b) What is the corresponding power-law at low temperatures for the energy $E \propto T^\alpha$ and the specific heat? (Hint: The independent modes of the wave-excitations can be described by the single-particle partition function for a harmonic oscillator).

Remark: Wave-excitations with different power-law dispersions occur frequently in solid state systems, where also the dimension of propagation can be restricted (by the geometry or by strong crystal-anisotropies). Examples for different dispersions $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|^\gamma$:
$\gamma=0$ for the Einstein Model, $\gamma=1$ for the Debye Model, $\gamma=2$ for ferromagnetic spin-waves.

Übungen (deutsche Version)

11.) Betrachte eine allgemeine Ein-Teilchenzustandssumme über quantisierte Freiheitsgrade $Z_1 = \sum_r e^{-\beta\varepsilon_r}$.

a) Was ist die Bedingung an die Temperatur, so dass $e^{-\beta\varepsilon_0} \gg e^{-\beta\varepsilon_1} \gg e^{-\beta\varepsilon_2}$ für die Grundszustandsenergie und die ersten beiden angeregten Energien gilt? Berechne Z_1 unter Vernachlässigung von $e^{-\beta\varepsilon_2}$ und höheren Termen und unter der Annahme, dass die Entartungen der Grundzustandsenergie und der ersten angeregten Energie mit g_0 und g_1 gegeben sind. Was sind der Energieerwartungswert und die spezifische Wärme als Funktion der Temperatur?

b) Wende das Ergebnis auf die quantisierte kinetische Energie von unabhängigen Teilchen in einem 3D Kastenpotential mit $V=L^3=1\text{nm}^3$ an. Was ist der Gültigkeitsbereich der Näherung für T jeweils für He-Atome und Elektronen?

c) Für *hohe* Temperaturen nutze die Summationsformel $\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\pi\alpha n^2} = \sqrt{\frac{1}{\alpha}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\pi m^2/\alpha}$ um die Korrektur erster Ordnung für die Zustandssumme, den Energieerwartungswert und die spezifische Wärme relativ zum idealen Gas zu bestimmen. Plotte das Ergebnis für die spezifische Wärme bei großen T zusammen mit dem Resultat aus a) für ein geeigneten Einheiten von T. Gibt es Hinweise auf ein Maximum in der spezifischen Wärme?

12.) Betrachte allgemeine Wellenanregungen mit einer Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|^\gamma$ die sich mit d-dimensionalen ($d = 1,2,3$) Wellenvektoren $\mathbf{k}$ ausbreiten können.

a) Bestimme die Zustandsdichte $g(\omega)$ für jeweils die Dimensionen $d = 1,2,3$ und beliebige $\gamma>0$.

b) Was ist entsprechend das Potenzgesetz des Tieftemperaturverhaltens für die Energie $E \propto T^\alpha$ und die spezifische Wärme? (Hinweis: Die unabhängigen Moden der Wellenanregungen sollen dabei durch die Einteilchenzustandssumme eines harmonischen Oszillators beschrieben werden).

Bemerkung: Wellenanregungen mit unterschiedlicher Dispersion kommen oftmals in Festkörpern vor, wobei auch die Ausbreitungs-Dimension eingeschränkt sein kann (durch beschränkte Geometrien oder starke Anisotropien der Kristalle). Ausgewählte Beispiele für die Dispersion $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|^\gamma$:
$\gamma=0$ für das Einstein Modell, $\gamma=1$ für das Debye Modell, $\gamma=2$ für ferromagnetische Spinwellen.

Verständnisfragen

54.) Was ist die Zustandssumme über die quantisierten Rotationsfreiheitsgrade eines Moleküls aus zwei verschiedenen Atomen? Berechne die Entwicklungen der Zustandssumme, der Energie und der spezifischen Wärme für hohe und für tiefe Temperaturen.

55.) Was muss bei der Zustandssumme über die quantisierten Rotationsfreiheitsgrade eines zwei-atomigen Moleküls beachtet werden, wenn das Molkül aus *identischen* Atomen besteht? Wie sieht dann die Zustandssumme für das Molekül H_2 aus? Was ist Para- und Orthowasserstoff?

56.) Berechne die Zustandssumme, den Energieerwartungswert und die spezifische Wärme für einen harmonischen Quantenoszillator. Was ist das Verhalten der spezifischen Wärme für die Vibrationsfreiheitsgrade eines Molekülgases?

57.) Was ist das Einstein-Modell?

58.) Erkläre im Detail das Debye Modell für die spezifische Wärme von Festkörpern. Was sind die wichtigen Näherungen? Definiere die Debye Frequenz und die Debye-Temperatur. Was ist das Tief- bzw. Hochtemperaturverhalten für die spezifische Wärme als Funktion der Temperatur?

59.) Welche Eigenschaften haben Materialen mit hoher bzw. niedriger Debye Temperatur. Warum?

60.) Leite die Einteilchenzustandsdichte für den Fall von drei-dimensionalen Wellenvektoren mit linearer Dispersionsrelation her.

61.) Beschreibe die Energieverteilung der Strahlung in einem Hohlraum als Funktion der Temperatur und der Frequenz (Plancksches Strahlungsgesetz). Leite es her.

62.) Berechne die Zustandssumme und den Druck für ein Photonengas in einem Hohlraum.