

## Übung Nr. 10

### Diskussionsthemen:

- Annahmen des Modells des idealen Gases und deren Gültigkeit.
- Kinetische Gastheorie.

### 31. Gleichverteilungssatz

- Wie lautet der Gleichverteilungssatz der klassischen statistischen Mechanik?
- Wie lautet die innere Energie des klassischen monoatomaren idealen Gases aus  $N$  Punktteilchen in drei Raumdimensionen? Begründen Sie Ihre Antwort.
- Wie lautet die Wärmekapazität eines Systems aus  $N$  unabhängigen klassischen harmonischen Oszillatoren? Die Kreisfrequenzen für die Schwingungen in die drei Raumdimensionen seien  $\omega_x$ ,  $\omega_y$  und  $\omega_z$ . Begründen Sie das Ergebnis.
- Erläutern Sie, was sich ändert, wenn die Oszillatoren quantenmechanischer Natur sind. Nutzen Sie eine Skizze des funktionalen Verlaufs der Wärmekapazitäten als Funktion der Temperatur.

### 32. Rotationen und Vibrationen der Moleküle eines diatomaren Gases

Eine empirische Formel für die potentielle Energie zwischen den beiden Atomen vom molekularen Wasserstoff  $H_2$  ist

$$V(r) = C \left[ e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)} \right],$$

mit  $r$  dem Abstand zwischen den zwei Wasserstoffatomen und  $C = 7 \cdot 10^{-19}$  J,  $a = 8 \cdot 10^{-10}$  m,  $\alpha = 2 \cdot 10^{10}$  m $^{-1}$  drei Konstanten.

Es wird angenommen, dass der typische Abstand der Atome dem Abstand  $d$  entspricht, wo diese potentielle Energie minimal ist.

#### i. Rotationen

Die kinetische Energie eines Körpers in Rotation um eine Achse ist  $L^2/2J$ , mit  $L^2$  dem Betragsquadrat des Drehimpulses und  $J$  dem Trägheitsmoment um die Achse (Theorie I). Dazu sind die Eigenwerte von  $L^2$  durch  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$  mit  $\ell$  einer nichtnegativen ganzen Zahl gegeben (Theorie II).

Hier betrachtet man eine Achse, die durch den Schwerpunkt des Moleküls führt und senkrecht auf der Verbindungslinie zwischen den beiden Atomen steht.

- Bestimmen Sie den Wert des Trägheitsmoments eines Moleküls um eine solche Achse.

*Hinweis:* Die Masse eines Wasserstoffatoms ist in sehr guter Näherung gleich der Protonenmasse!

- Was ist die Energiedifferenz zwischen den niedrigsten quantenmechanischen Rotationsniveaus?
- Geben Sie eine Größenordnung der Temperatur an, ab der die Rotationsfreiheitsgrade zur Wärmekapazität beitragen.

#### ii. Vibrationen

Jetzt betrachtet man die Vibrationen der Wasserstoffatome um deren Gleichgewichtsstelle.

- Bestimmen Sie die (Kreis)Frequenz dieser Vibrationen.

*Hinweis:* Betrachten Sie kleine Auslenkungen aus der Gleichgewichtsstelle.

- Was ist die Energiedifferenz zwischen zwei quantenmechanischen Vibrationsniveaus?
- Geben Sie eine Größenordnung der Temperatur an, ab der die Vibrationsfreiheitsgrade zur Wärmekapazität beitragen.

iii. Geben Sie ohne Berechnung den approximativen Wert der isochoren Wärmekapazität pro Molekül von molekularem Wasserstoff bei den folgenden Temperaturen:

$$T_1 = 25 \text{ K}, \quad T_2 = 250 \text{ K}, \quad T_3 = 2500 \text{ K}, \quad T_4 = 10000 \text{ K}.$$

Welche physikalischen Phänomene wurden vernachlässigt?

### 33. Virialkoeffizienten für das Lennard–Jones-Potential

Ein üblicher und realistischer Ansatz für die potentielle Energie zwischen zwei Atomen ist das *Lennard–Jones-Potential*:

$$V(r) = V_0 \left( \frac{r_0^{12}}{r^{12}} - 2 \frac{r_0^6}{r^6} \right),$$

mit  $r$  dem Abstand zwischen den Atomen und  $r_0, V_0$  zwei Konstanten. Die  $1/r^6$ -Potenz des attraktiven Teils entspricht einer induzierten Dipol-Dipol-Wechselwirkung, während die  $1/r^{12}$ -Potenz ein phänomenologischer Ansatz für die starke Abstoßung bei kleineren Abständen ist. Realistische Parameter für  $^4\text{He}$ -Atome sind  $V_0 = 1,41 \cdot 10^{-22} \text{ J}$  und  $r_0 = 2,87 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ .

- i. Skizzieren Sie das Potential. Wo liegen die Nullstelle  $\sigma$  und das Minimum  $\sigma'$  des Potentials?
- ii. Berechnen Sie den zweiten Virialkoeffizienten  $B_2(T)$  unter Verwendung von  $|V/k_B T| \ll 1$  im attraktiven Bereich des Potentials und von  $\exp(-V/k_B T) \approx 0$  im Bereich  $r \leq \sigma$ . Geben Sie die Parameter  $a$  und  $b$  der van der Waals-Gleichung an.