Vorbemerkung zu Aufgabe 45 und 46: Für ein System von effektiv entkoppelten, d. h. wechselwirkungsfreien harmonischen Oszillatoren faktorisieren die klassische und die quantenmechanische Zustandssumme. Es ist daher sinnvoll, die Zustandssumme eines einzelnen klassischen oder quantenmechanischen Oszillators zu analysieren. Alle abgeleiteten thermodynamischen Größen ergeben sich dann als das Vielfache der entsprechenden Größen für einen einzelnen Oszillator.

Aufgabe 45: Statistik eines kanonischen Ensembles von klassischen harmonischen Oszillatoren (5 Punkte)

Betrachten Sie nach der obigen Vorbemerkung einen eindimensionalen, klassischen harmonischen Oszillator mit der Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2\,m} + \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,q^2 \ .$$

a) Geben Sie die kanonische Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_1\,(p,\,q)$ an und berechnen Sie die Zustandssumme Z_1^{kl}.

b) Überprüfen Sie, ob $\rho_1\,(p,\,q)$ eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist.

c) Berechnen Sie die thermischen Mittelwerte $\langle \mathcal{H} \rangle$, $\langle q \rangle$ und $\langle q^2 \rangle$ sowie den Beitrag eines Oszillators zur spezifischen Wärme.

Aufgabe 46: Statistik eines kanonischen Ensembles von quantenmechanischen harmonischen Oszillatoren (9 Punkte)

Betrachten Sie unter Beachtung der Vorbemerkung einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hbar\,\omega\,\left[\hat{a}^+\,\hat{a} + \frac{1}{2}\right]$$

und

$$\hat{H}\,|n\rangle = E_n\,|n\rangle \qquad \text{mit} \qquad E_n = \hbar\,\omega\,\left(n + \frac{1}{2}\right)\ , \qquad n = 0,\,1,\,\ldots,\,\infty\ .$$

a) Geben Sie den kanonischen Dichteoperator $\hat{\rho}_1$ in der Form

$$\hat{\rho}_1 = \sum_n P_n\,|n\rangle\,\langle n|$$

an und berechnen Sie die Zustandssumme Z_1^{qm}.

b) Überprüfen Sie, ob $\hat{\rho}_1$ die Eigenschaften eines Dichteoperators hat.

c) Bestimmen Sie die statistischen Erwartungswerte $\langle \hat{H} \rangle$, $\langle \hat{q} \rangle$ und $\langle \hat{q}^2 \rangle$ sowie den Beitrag des Oszillators zur spezifischen Wärme.

d) Berechnen Sie das Limesverhalten der Ergebnisse aus a) und c) für hohe und niedrige Temperaturen $\dfrac{\hbar\,\omega}{2\,k_B\,T} \ll 1$ bzw. $\gg 1$ und vergleichen Sie mit den Ergebnissen aus Aufgabe 45. Warum folgen im Hochtemperaturlimes die klassischen Ergebnisse?

Hinweis: $$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\,m\,\omega}}\,\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right) =: \gamma\,\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right)\ .$$

Aufgabe 47: **Statistik des klassischen idealen Gases: großkanonisches Ensemble** **(6 Punkte)**

In der Vorlesung haben Sie die großkanonische Zustandssumme

$$\mathfrak{z}(T,\,V,\,\mu)\;=\;\mathrm{e}^{\frac{V}{\lambda^3}\,\mathrm{e}^{\beta\,\mu}}$$

des einkomponentigen, monoatomaren, idealen klassischen Gases kennengelernt. Dabei sind die mittlere Energie U und die mittlere Teilchenzahl $\bar{N}$ fest vorgegeben. Aus obiger Zustandssumme folgt die gesamte Thermodynamik des Systems.

a) Bestimmen Sie

1) das großkanonische Potential $\Omega\,(T,\,V,\,\mu)$,
2) die mittlere Teilchenzahl $\bar{N}\,(T,\,V,\,\mu)$ und
3) den Druck $p\,(T,\,V,\,\mu)$.

Stellen Sie mit Hilfe von 2) und 3) die thermische Zustandsgleichung des Gases auf.

b) Bestimmen Sie

4) mit Hilfe von 2) das chemische Potential $\mu\,(T,\,V,\,\bar{N})$ des Gases und
5) mit Hilfe von 1) die Entropie $S\,(T,\,V,\,\mu)$ in der Darstellung des großkanonischen Potentials.

Mit $\mu\,(T,\,V,\,\bar{N})$ nach 4) folgt dann

6) die Entropie $S\,(T,\,V\,\bar{N})$ in der Darstellung der freien Energie.

c) Leiten Sie aus

$$\Omega\;=\;U\;-\;T\,S\;-\;\mu\,\bar{N}$$

und mit Hilfe von 2) und 5) die kalorische Zustandsgleichung des Gases ab und verwenden Sie diese schließlich, um

7) $S\;=\;S\,(U,\,V,\,\bar{N})$ in der Entropiedarstellung anzugeben.