

**Aufgabe 15: Wärmekapazität von Gasen (mündlich, 4 Punkte)**

Die Schwingungen der Moleküle H_2 , N_2 , HCl , Cl_2 bzw. CO_2 finden sich bei Wellenzahlen von 4401 cm^{-1} , 2358 cm^{-1} , 2886 cm^{-1} , 561 cm^{-1} bzw. 667 cm^{-1} (bei CO_2 ist dies die niedrigstfrequente von vier Schwingungen). Bestimmen Sie im quantenmechanischen kanonischen Ensemble den Beitrag dieser Schwingungen zur Wärmekapazität bei Raumtemperatur. Bestimmen Sie ferner (numerisch) diejenige Temperatur, bei der die Schwingung $\frac{1}{2}k_B$ (d.h. die Hälfte des klassischen Ergebnisses) zur Wärmekapazität beiträgt. Bei welchen der Gase ist die Aussage gerechtfertigt, „der Schwingungsfreiheitsgrad sei bei Raumtemperatur eingefroren und trage zur Wärmekapazität nicht bei“?

Aufgabe 16: Ideales Gas im Schwerfeld (mündlich, 6 Punkte)

Betrachten Sie N Teilchen eines klassischen einatomigen idealen Gases im homogenen Schwerfeld, d.h. $V_{\text{ext}}(\vec{r}) = mgz$ für $z \geq 0$. Stellen Sie sich der Einfachheit halber vor, das Gas befinde sich in einem unendlich hohen ($0 \leq z \leq \infty$) zylindrischen Behälter mit einem Boden bei $z = 0$. Benutzen Sie im Folgenden die kanonische Gesamtheit mit einer vorgegebenen Temperatur T .

- [2P] Wie groß ist die mittlere kinetische Energie eines Gasteilchens?
- [2P] Wie groß ist die mittlere potentielle Energie eines Gasteilchens?
- [1P] Wie lautet die Dichteverteilung $\rho(z)$ des Gases?
- [1P] Überzeugen Sie sich, dass die Ergebnisse aus a) und b) mit dem Gleichverteilungssatz verträglich sind.

Aufgabe 17: Spur und Dichtematrix (schriftlich, 10 Punkte)

- [2P] Zeigen Sie, dass die Spur eines Produktes aus zwei Matrizen invariant ist gegen Vertauschung der beiden Matrizen.
- [1P] Zeigen Sie (als Verallgemeinerung von a)), dass die Spur eines Produktes aus M Matrizen invariant ist gegen zyklische Vertauschung der M Faktoren.
- [3P] Zeigen Sie, dass die Spur eines Operators basisunabhängig ist. Verwenden Sie hierbei die Tatsache, dass eine Basistransformation durch eine unitäre Matrix U beschrieben wird, und verwenden Sie die Ergebnisse aus b).
- [2P] Gegeben sei ein quantenmechanischer harmonischer Oszillator im thermischen Gleichgewicht mit einem Wärmebad der Temperatur T . Geben Sie die Dichtematrix an. Verändert sich die Dichtematrix mit der Zeit?
- [2P] Gegeben sei ein quantenmechanischer harmonischer Oszillator, der zur Zeit $t = 0$ im Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ vorliegen möge. Geben Sie die Dichtematrix zu $t = 0$ an. Verändert sich die Dichtematrix mit der Zeit?