1. Die klassische Hamilton-Funktion eines eindimensionalen harmonischen Oszillators der Masse m und der Kreisfrequenz ω lautet

$$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\,,$$

worin p der Impuls und x die Ortsvariable sind. Damit ergibt sich die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte im (zweidimensionalen) Phasenraum zu

$$\varrho(p,x) = Z^{-1}\mathrm{e}^{-\beta H(p,x)}$$

mit $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B Boltzmann-Konstante und T Temperatur. Für diese Aufgabe benötigen Sie

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha^2 y^2}\, dy = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\,.$$

Das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} y^2 \mathrm{e}^{-\alpha^2 y^2}\, dy$ kann man durch Differentiation nach α herleiten.

(a) Bestimmen Sie die Normierungskonstante Z, die Zustandssumme, so dass die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \varrho(p,x)\, dpdx = 1$$

erfüllt ist.

(b) Berechnen Sie die thermodynamischen Mittelwerte

$$\langle T\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m}\varrho(p,x)\, dpdx$$

und

$$\langle V\rangle = \left\langle \frac{m\omega^2}{2}x^2\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{m\omega^2}{2}x^2\varrho(p,x)\, dpdx$$

der kinetischen und der potentiellen Energie und den thermodynamischen Mittelwert $\langle E\rangle$ der gesamten Energie.

2. Quantenmechanisch sind die Energieeigenwerte eines eindimensionalen harmonischen Oszillators der Kreisfrequenz ω gegeben durch

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\,,$$

worin n alle Werte $n = 0, 1, 2, 3, \cdots$ annimmt. Der Zustand E_n ist mit der Wahrscheinlichkeit

$$\varrho_n = Z^{-1}\mathrm{e}^{-\beta E_n}$$

besetzt mit $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B Boltzmann-Konstante und T Temperatur.

(a) Zeigen Sie, dass die Normierungsbedingung

$$\sum_{n=0}^{\infty} \varrho_n = 1$$

den Ausdruck

$$Z = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}$$

für die Zustandssumme ergibt.

(b) Zeigen Sie, dass der thermodynamische Erwartungswert

$$\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n \varrho_n$$

der Energie auf die Form

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\left[1 + \frac{2}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega} - 1}\right] = \frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)$$

gebracht werden kann. Bestimmen Sie die Grenzwerte von $\langle E \rangle$ fuer sehr niedrige und sehr hohe Temperaturen.

3. Der thermodynamische Mittelwert der Energie eines quantenmechanischen Systems mit Energieeigenwerten E_n ist gegeben durch

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n \varrho_n \,,$$

worin

$$\varrho_n = Z^{-1} \mathrm{e}^{-\beta E_n}$$

und

$$Z = \sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n} \,.$$

(a) Zeigen Sie

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \,.$$

(b) Zeigen Sie auch

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} \left\langle (E - \langle E \rangle)^2 \right\rangle \,.$$

(c) Die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte ϱ im Phasenraum eines Systems aus N

Teilchen kann als Funktion der dreidimensionalen Ortskoordinaten $\mathbf{r}_i$ und Impulse $\mathbf{p}_i$, $i = 1, 2, \cdots, N$, der Teilchen geschrieben werden, wenn keine Nebenbedingungen vorliegen. Damit hat man $\varrho = \varrho(\mathbf{R}, \mathbf{P})$ bei Zeitunabhängigkeit, worin die jeweils $3N$-dimensionalen Vektoren $\mathbf{R}$ und $\mathbf{P}$ durch $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N)$ und $\mathbf{P} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \cdots, \mathbf{p}_N)$ gegeben sind. Die Einteilchendichte $\varrho_1(\mathbf{x})$ ($\mathbf{x}$ dreidimensionale Ortsvariable) ist definiert als

$$\varrho_1(\mathbf{x}) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta\left(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i\right) \right\rangle = \sum_{i=1}^{N} \int \delta\left(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i\right) \varrho(\mathbf{R}, \mathbf{P})\, d\mathbf{R} d\mathbf{P}\,,$$

worin δ die dreidimensionale Dirac-Deltafunktion ist und die Integrationen über $\mathbf{R}$ und $\mathbf{P}$ jeweils $3N$-dimensionale Integrationen sind.
Die Teilchen mögen sich in einem äusseren Potential der Gestalt

$$\mathcal{U}_{\text{ext}}(\mathbf{R}) = \sum_{i=1}^{N} u_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i)$$

befinden. Zeigen Sie, dass der thermodynamische Mittelwert

$$\langle \mathcal{U}_{\text{ext}} \rangle = \int \mathcal{U}_{\text{ext}}(\mathbf{R}) \varrho(\mathbf{R}, \mathbf{P})\, d\mathbf{R} d\mathbf{P}$$

der äusseren potentiellen Energie in der Form

$$\langle \mathcal{U}_{\text{ext}} \rangle = \int \varrho_1(\mathbf{x}) u_{\text{ext}}(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}$$

geschrieben werden kann.

4. Ein quantenmechanisches System möge drei nicht entartete Energieeiegenwerte $-\epsilon$, 0, und ϵ besitzen. T sei seine Temperatur.

(a) Geben Sie die Zustandssumme und die Besetzungswahrscheinlichkeiten $\varrho_{-\epsilon}$, ϱ_0, und ϱ_ϵ fuer die drei Energiezustände an.

(b) Leiten Sie Ausdrücke für die Helmholtzsche freie Energie F und die Entropie S her.

(c) Zeigen Sie, dass die thermodynamische Energie von der Gestalt

$$E = -2\epsilon \frac{\sinh(\beta\epsilon)}{1 + 2\cosh(\beta\epsilon)}$$

ist.

(d) Zeigen Sie, dass die Wärmekapazität bei konstantem Volumen gegeben ist durch

$$C_V = 2k_B \left(\frac{\epsilon}{k_B T}\right)^2 \frac{2 + \cosh(\beta\epsilon)}{\left[1 + 2\cosh(\beta\epsilon)\right]^2}\,.$$