

5. Tutorium - Statistische Physik I - 9.05.2014

15. Betrachten Sie einen quantenmechanischen harmonischen Oszillator, der durch einen Dichteoperator der Form

$$\rho = c \sum \frac{1}{n!} |n\rangle \langle n|$$

(mit Normierungskonstante c) beschrieben wird.

- Handelt es sich um einen reinen oder einen gemischten Zustand?
 - Bestimmen Sie die Normierungskonstante c .
 - Berechnen Sie die Energie des Systems.
 - Berechnen Sie den Erwartungswert des Ortes $\langle X \rangle$ und seine Schwankung. Verwenden Sie dabei die Erzeuger- und Vernichter-Algebra ($X = \alpha(a + a^\dagger)$).
16. Betrachten Sie eine Oberfläche, auf der sich Adsorbate ansammeln können. Nähern Sie jedes Adsorbatmolekül als klassischen dreidimensionalen harmonischen Oszillator (Frequenz ω). Die Oberfläche hat die Temperatur T und ist in Kontakt mit einem Gas aus Adsorbaten, das als Teilchenreservoir fungiert (chemisches Potential μ).
- Berechnen Sie die großkanonische Zustandssumme des Systems.
 - Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit $P(N)$, dass sich genau N Teilchen auf der Oberfläche befinden,

$$P(N) = \frac{1}{h^{3N} N!} \int d\mathbf{p}^N d\mathbf{q}^N \rho_g(p^N, q^N),$$

mit der großkanonischen Verteilungsfunktion ρ_g .

- Zeigen Sie dass $P(N)$ normiert ist.
 - Berechnen Sie die mittlere Teilchenzahl $\langle N \rangle$, und stellen Sie $P(N)$ als Funktion von $\langle N \rangle$ dar. Zeigen Sie, dass es sich um eine Poisson-Verteilung handelt.
 - Berechnen Sie $\langle E \rangle$ und die Wärmekapazität des Systems.
17. Betrachten Sie ein ideales Gas von N ununterscheidbaren, nicht wechselwirkenden, zweiatomigen Molekülen, die sich in einem Behälter mit Volumen V befinden. Die Hamiltonfunktion eines Moleküles sei gegeben durch

$$\mathcal{H}_{\text{mol}}(\mathbf{p}_A, \mathbf{p}_B, \mathbf{q}_A, \mathbf{q}_B) = \frac{\mathbf{p}_A^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_B^2}{2m} + D |q_A - q_B|^2,$$

wobei $D > 0$, und die Indizes A und B sich auf die zwei unterschiedlichen Atome in einem Molekül beziehen. Die Hamilton-Funktion des Gesamtsystems ist

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}_{1A}^N, \mathbf{p}_{aB}^N, \mathbf{q}_{1A}^N, \mathbf{q}_{aB}^N) = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_{\text{mol}}(\mathbf{p}_{iA}, \mathbf{p}_{iB}, \mathbf{q}_{iA}, \mathbf{q}_{iB})$$

Das Gas befinde sich in Kontakt mit einem Wärmebad der Temperatur T (kanonisches Ensemble).

- (a) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme
- (b) Berechnen Sie die freie Energie sowie die Wärmekapazität des Systems;
- (c) Interpretieren Sie ihr Ergebnis in Hinblick auf den Gleichverteilungssatz;
- (d) Berechnen Sie den mittleren quadratischen Abstand der Atome eines Moleküls ($\langle |\mathbf{q}_{iA} - \mathbf{q}_{iB}|^2 \rangle$) als Funktion der Temperatur.

Hinweis: Verwenden Sie Schwerpunkts- und Abstandsvektoren innerhalb der Moleküle.

Zu kreuzen: 15abc,15d,16ab,16cd,16e,17ab,17cd