

H 8.1

Teil a

Berechne Z_c .

$$Z_c = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}}$$

$$\begin{aligned} Z_c &= \sum_{n_i=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar\omega (n_i + \frac{1}{2})}{kT}\right) = \sum_{n_i=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega n_i}{kT}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \sum_{n_i=1}^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right]^{n_i} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \frac{1 - 0}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)} \\ &= \frac{\alpha^{-\frac{1}{2}}}{1 - \alpha^{-1}} = \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\alpha^{-\frac{1}{2}} (\alpha^{\frac{1}{2}} - \alpha^{-\frac{1}{2}})} = \frac{1}{2} \operatorname{csch}\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \end{aligned}$$

Wenn wir den Zustand $|n\rangle$ haben, das ein Mikrozustand ist, dann ist die Energie fest.

Also muss $\sum_i E_n = E$ sein.

Moment, es ist nur nach den möglichen Werten gefragt.

$$\begin{aligned} \text{Dies ist: } E &= \sum_i E_n = \sum_i \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega \frac{N}{2} + \underbrace{\hbar\omega \sum_i n_i}_{\geq 0} \end{aligned}$$

Teil b

Die Innere Energie ist:

$$U = \langle E \rangle$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z_C} \sum_{i=1}^{\infty} E_i \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$$

$$= 2 \sinh\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \sum_{i=1}^{\infty} \hbar\omega\left(i+\frac{1}{2}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega\left(i+\frac{1}{2}\right)}{kT}\right)$$

$$= 2 \sinh\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \sum_{i=1}^{\infty} \hbar\omega\left(i+\frac{1}{2}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega i}{kT}\right)$$

$$= 2 \sinh\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \hbar\omega \underbrace{\sum_{i=1}^{\infty} \left(i+\frac{1}{2}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega i}{kT}\right)}$$

$$\frac{-1 + 3 \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)}{2 \left(-1 + \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right)^2}$$

$$= \hbar\omega \sinh(-\alpha) \frac{-\exp\left(-\frac{\alpha}{2}\right) + 3 \exp\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{2 - 2 \exp(\alpha) + 2 \exp(2\alpha)}$$

Teil c

Bestimme die freie Energie:

$$F(T) = -kT \ln(Z_c) \\ = -kT \ln\left(\frac{1}{2} \operatorname{csch}\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right)$$

$$F = U - TS$$

$$U = F + TS$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \cancel{kT} \cdot \frac{1}{\frac{1}{2} \operatorname{csch}(\dots)} \cdot \left(-\operatorname{coth}(\dots) \cdot \cancel{\operatorname{csch}(\dots)}\right) \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{kT^2}\right)$$

$$TS = -\frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{coth}\left(-\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right)$$

Somit ist

$$U = -kT \ln\left(\frac{1}{2} \operatorname{csch}\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right) - \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{coth}\left(-\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right).$$

Das ist schon ziemlich sperrig.

Teil d

$$G_X(T) = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_X$$

$$S = - \frac{\partial F}{\partial T} \quad \text{aus der vorliegenden Aufgabe.}$$

$$S = - \frac{\hbar\omega}{2T} \coth \left(- \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right) \right)$$

$$\coth' = - \operatorname{csch}^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial T} = \frac{\hbar\omega}{2T^2} \coth(\dots) + \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{csch}^2(\dots) \frac{\hbar\omega}{kT^2}$$

$$C(T) = \frac{\hbar\omega}{2T} \coth(\dots) + \frac{\hbar^2\omega^2}{2kT^2} \operatorname{csch}^2(\dots)$$

Mit $\alpha := \frac{\hbar\omega}{kT}$ wird dies:

$$C = \frac{k}{2} \alpha \coth(\alpha) + \frac{k}{2} \alpha^2 \operatorname{csch}^2(\alpha)$$

Für $\alpha \ll 1$, also $kT \gg \hbar\omega$ werden beide Summanden $\frac{k}{2}$, also $C = k$.

Für $\alpha \gg 1$, also $kT \ll \hbar\omega$ geht der erste gegen ∞ , der zweite gegen 0.