H 8.1

Teil a

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

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

$$= \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \sum_{n_i=1}^{\infty}\left[\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right]^{n_i} = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)\frac{1-0}{1-\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)}$$

$$= \frac{\alpha^{-\frac{1}{2}}}{1-\alpha^{-1}} = \frac{\alpha^{-\frac{1}{2}}}{\alpha^{-\frac{1}{2}}\left(\alpha^{\frac{1}{2}}-\alpha^{-\frac{1}{2}}\right)} = \frac{1}{2}\operatorname{csch}\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)$$

Wenn wir den Zustand $|n\rangle$ haben, der 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.

Dies ist: $\quad E = \sum_i E_n = \sum_i \hbar\omega\left(n_i + \frac{1}{2}\right)$

$$= \hbar\omega\frac{N}{2} + \underbrace{\hbar\omega\sum_i n_i}_{\geq 0}$$

Teil b

Die Innere Energie ist:

$$U = \langle E \rangle$$

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

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

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

$$= 2\sinh\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \hbar\omega \underbrace{\sum_{i=1}^{\infty} \left(i+\frac{1}{2}\right) \exp\left(-\frac{\hbar\omega i}{kT}\right)}_{\frac{-1+3\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)}{2\left(-1+\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right)^2}}$$

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

Ein Teilchen erwartungswert.

$$\langle n \rangle = \sum_n W(n)\, n$$

$$= \frac{1}{Z_c} \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) n$$

$$= \frac{1}{Z_c} \sum_n \exp\left(-\frac{\hbar\omega\,(n+\frac{1}{2})}{kT}\right) n$$

Jetzt nicht die Reihe ausrechnen, sondern wieder eine Ableitung draus machen.

$$-\frac{\partial}{\partial \frac{\hbar\omega}{kT}} \ln\left|\sum_n \exp\left(-\frac{\hbar\omega\,(n+\frac{1}{2})}{kT}\right)\right| = \frac{\sum_n \exp\left(-\frac{\hbar\omega\,(n+\frac{1}{2})}{kT}\right)(n+\frac{1}{2})}{\sum_n \exp(\ldots)}$$

$$= \frac{\sum_n \exp\left(-\frac{\hbar\omega\,(n+\frac{1}{2})}{kT}\right) n}{\sum_n \exp(\ldots)} + \frac{1}{2}$$

Also kann ich das so schreiben. Nächster Schritt:

$$= -\frac{\partial}{\partial \frac{\hbar\omega}{kT}} \ln\left(Z_{c,1}\right) - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \frac{\hbar\omega}{kT}} \ln\left(2 \sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)\right) - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{1}{2\sinh(\ldots)} \cdot 2\cosh(\ldots) \cdot \frac{1}{2} - \frac{1}{2}$$

$$= \frac{1}{2}\left[\coth(\ldots) - 1\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{e^{\cdots} + e^{-\cdots}}{e^{\cdots} - e^{-\cdots}} - 1\right]$$

$$\frac{\alpha^{1} + \alpha^{-1}}{\alpha^{1} - \alpha^{-1}} - 1 = \frac{\alpha + \alpha^{-1} - \alpha + \alpha^{-1}}{\alpha - \alpha^{-1}}$$

$$= \frac{2\alpha^{-1}}{\alpha - \alpha^{-1}} = 2\,\frac{\alpha^{-1}}{\alpha^{-1}(\alpha^2 - 1)} = 2\,\frac{1}{\alpha^2 - 1}$$

$$= \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}$$

Teil c

Bestimme die freie Energie:

$$F(T) = -kT \ln(Z_c)$$

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

$$F = U - TS \qquad U = F + TS$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \cancel{k}\cancel{T}N \frac{1}{\frac{1}{2}\cancel{\operatorname{csch}(\ldots)}} \cdot \left(-\coth(\ldots)\cdot \cancel{\operatorname{csch}(\ldots)}\right)\cdot\left(\frac{h\omega}{\cancel{k}T^2}\right)$$

$$+ kN\ln\left(\frac{1}{2}\operatorname{csch}\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right)$$

$$TS = -\frac{h\omega}{2}N\coth\left(-\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right) + NkT\ln\left(\frac{1}{2}\operatorname{csch}\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right)$$

Somit ist $U = -N\frac{h\omega}{2}\coth\left(-\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)\right)$

$$= N\frac{h\omega}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)$$

Dies stimmt mit dem vorherigen U überein.

Teil d

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

$S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ aus der vorherigen Aufgabe.

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

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

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

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

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.