Aufgabe 1 (3 Punkte)

Betrachten Sie ein klassisches Gas N nicht wechselwirkender Moleküle, die jeweils aus zwei Atomen bestehen und sich im Volumen V befinden. Der Hamilton Operator eines einzelnen Moleküls sei gegeben durch

$$H(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{|\vec{p}_1|^2 + |\vec{p}_2|^2}{2m} + \frac{K}{2}|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2,$$

wobei $\vec{p}_1$, $\vec{p}_2$, $\vec{r}_1$ und $\vec{r}_2$ die Impulse und Koordinaten der zwei Atome eines Moleküls sind. Berechnen Sie

- das Helmholtz Potential,
- die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen (C_V),
- den mittleren Abstand $\langle |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 \rangle$.

Sie dürfen benutzen, daß $\int d^3\vec{r}_1\, d^3\vec{r}_2\, f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \int d^3\vec{R}_{cm}\, d^3\vec{r}\, f(\vec{R}_{cm}, \vec{r})$ gilt, wobei $\vec{R}_{cm} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$ and $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$.

Aufgabe 2 (3 Punkte)

Gegeben sei ein System nicht wechselwirkender Teilchen.

- $Q_1(T, V)$ sei die Zustandssumme des kanonischen Ensembles für ein Teilchen. Zeigen Sie, daß die groß-kanonische Zustandssumme von der Form $\tau(z, T, V) = e^{zQ_1(T,V)}$ ist. (Hinweis: Sie müssen sich an einer Stelle an die Taylor Entwicklung der Exponentialfunktion erinnern).
- Nehmen Sie an, daß die Energie der nicht wechselwirkenden Teilchen eine beliebige Funktion der Geschwindigkeit ist, unabhängig von der Position. Finden Sie die Zustandsgleichung mit Hilfe des groß-kanonischen Ensembles, und vergleichen Sie diese mit dem Resultat, das man für $E = p^2/2m$ erhält.

Aufgabe 3 (4 Punkte)

Wir wollen uns nun ein klassisches System von N Teilchen in einem Volumen V anschauen. Die Wechselwirkung der Teilchen ist durch ein Zweiteilchenpotential $u(r)$ gegeben, wobei $r = |\vec{r}|$ der Abstand der zwei Teilchen ist. Der Hamilton Operator des Systems sieht damit wie folgt aus:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\vec{p}_i|^2}{2m} + \sum_{i<j} u_{ij},$$

wobei $u_{ij} = u(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ und $\vec{r}_i$ die Position des $i$ten Teilchens ist. Wir definieren die Funktion $f(r) \equiv e^{-\beta u(r)} - 1$, mit $\beta = 1/k_B T$.

1. Benutzen Sie die Theorie des kanonischen Ensembles, um zu zeigen, daß

$$\frac{Pv}{k_B T} = 1 + v \frac{\partial}{\partial v} R(v,T)$$

gilt, wobei $v = V/N$ das spezifische Volumen ist,

$$R(v,T) \equiv \frac{1}{N} ln \left\{ \frac{1}{v^N N^N} \int d^{3N}\vec{r} \prod_{i<j} (1 + f_{ij}) \right\}$$

gilt und $f_{ij} = f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$.

2. Falls die Wechselwirkung sehr schwach ist, kann man zeigen, daß

$$\frac{Pv}{k_B T} \simeq 1 + \frac{1}{v} a_2(T)$$

gilt mit $a_2(T) \equiv -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr 4\pi r^2 f(r)$.
Berechnen Sie den Koeffizienten $a_2(T)$ für das Potential $u(r) = 0$ falls $r < \sigma$, $u(r) = -\epsilon$ im Bereich $\sigma < r < r_0$ und $u(r) = 0$ für $r > r_0$.