INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK
TECHNISCHE UNIVERSITÄT BRAUNSCHWEIG

Prof. Dr. W. Brenig
Dipl.-Ing. Ch. Jurecka

THERMODYNAMIK UND STATISTISCHE MECHANIK WS 1998/99

13. Übungsblatt Abgabe: Dienstag, 19. 1. 99, bis 11.25 Uhr

---

34. **Thermodynamische Störungsrechnung**

Man leite die Potenzreihenentwicklung der freien Energie her[1] unter Verwendung von $Z = \sum_n \exp(-\beta E_n)$ und der Energieformel der Schrödinger'schen Störungstheorie

$$E_n = \epsilon_n + W_{nn} + \sum_{m(\neq n)} \frac{|W_{nm}|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m} + \ldots . \tag{1}$$

35. **Klassische thermodynamische Störungsrechnung**

Setzen Sie die klassische Zustandssumme für ein System mit Hamiltonfunktion

$$H = H_0 + \lambda W \tag{2}$$

an. Entwickeln Sie dann die Exponentialfunktion des Störpotentials W in einer Potenzreihe. Brechen Sie nach dem zweiten Glied ab und berechnen Sie die (klassische) freie Energie des Systems. Unter welcher Bedingung für W stimmt die klassische mit der quantenmechanischen Störungsrechnung überein?

36. **Ortho- und Parastickstoff**

Ein $^7N_{14}$ Kern hat Kernspin $I = 1$. Nehmen Sie an, daß das zweiatomige N_2 rotieren kann, aber weder schwingt noch Translationsbewegungen ausführt. Berechnen Sie das Verhältnis N_{ortho}/N_{para} von Ortho- zu Paramolekülen (a) bei hohen Temperaturen und (b) bei tiefen Temperaturen. Berechnen Sie auch den Grenzwert für $T = 0$. Hinweis: Man vergewissere sich, daß Kopplung der Kernspins 6 symmetrische und 3 antisymmetrische Kernspinwellenfunktionen des Moleküls ergibt.

37. **Zeitordnung**

(a) Zeigen Sie

$$\mathrm{Sp}\left[e^{-\beta H_0} T_\tau(W(\tau_1)\ldots W(\tau_n))\right] = \mathrm{Sp}\left[e^{-\beta H_0} T_\tau(W(\tau_1+\alpha)\ldots W(\tau_n+\alpha))\right] \tag{3}$$

Hinweis: Multiplizieren Sie die Ausgangsgleichung mit $e^{-\alpha H_0}e^{\alpha H_0}$ und verwenden Sie die zyklische Vertauschbarkeit der Spur.

(b) Zeigen Sie mit (a), daß

$$\mathrm{Sp}\left[e^{-\beta H_0}\int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' T_\tau(W(\tau')W(\tau''))\right] = \tag{4}$$

$$\mathrm{Sp}\left[e^{-\beta H_0}\int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' T_\tau(W(\tau'-\tau'')W(0))\right] = \tag{5}$$

$$\mathrm{Sp}\left[e^{-\beta H_0}\beta\int_0^\beta d\alpha W(\alpha)W(0)\right]. \tag{6}$$

---

[1] Bis zur 2.Ordnung!