UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Matthias Fuchs
Raum P 907, Tel. (07531)88-4678
E-mail: matthias.fuchs@uni-konstanz.de

Übungen zur Statistischen Mechanik
Wintersemester 2005/06

Übungsblatt 3, Ausgabe 08.11.2005, abzugeben bis 14.11.2005
Besprechung in der Zentralübung am 14.11.2005.

Präsenzaufgaben

15. **Quantenmechanischer harmonischer Oszillator**
Der Hamiltonoperator eines (eindimensionalen) harmonischen Oszillators laute:

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) ,$$

wobei $[a, a^\dagger] = 1$. In der kanonischen Gesamtheit lautet der Dichteoperator $\rho = e^{-\beta H}$.

a) Wählen Sie eine geeignete Orthonormalbasis, in der ρ diagonal ist. Wie lautet dann die Zustandssumme $Z = Sp\rho$?
Hinweis: Sie müssen eine geometrische Reihe berechnen.

b) Wie lautet die mittlere Energie $\langle E \rangle = SpH\rho$? Schreiben Sie sie als $\langle E \rangle = \hbar\omega \left(\langle n \rangle + \frac{1}{2} \right)$ und bestimmen Sie die sogenannte thermische Besetzungszahl $\langle n \rangle$.

c) Betrachten Sie nun den entarteten zweidimensionalen harmonischen Oszillator gegeben durch:

$$H = \hbar\omega \sum_{i=1}^{2} \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) ,$$

mit $[a_i, a_i^\dagger] = 1$ und verschwindenden anderen Kommutatoren.

(i) Wann beschreiben zwei harmonische Oszillatoren unabhängige Variablen?

(ii) Zeigen Sie, dass die Zustandssumme des zweidimensionalen Oszillators $Z_2 = Z_1^2$ erfüllt, wobei Z_1 die Zustandssumme des eindimensionalen Oszillators aus Teilaufgabe a) ist.

(iii) Bestimmen Sie damit den Entartungsgrad der Energieniveaus des zweidimensionalen Oszillators, also wie häufig eine gegebene ganze Zahl als Summe zweier ganzer Zahlen geschrieben werden kann.
Hinweis: Verwenden Sie $(1 - x)^{-2} = \sum_{m=0}(1 + m)x^m$ und bestimmen Sie Z_2 auf zwei verschiedene Weisen.

16. **Paramagnetische Salze**
Die Wahrscheinlichkeitsverteilung von N unabhängigen Spins im konstanten Magnetfeld soll in der sogenannten 'mikrokanonischen' Gesamtheit bestimmt werden, in welcher alle

möglichen Einstellungen der Spins, die zu einer Energie E im Bereich $[E, E+\Delta E]$ führen, gleichwahrscheinlich sind, also:

$$p(E,B,N) = \frac{1}{W} \qquad \text{mit } W \text{ der Anzahl von Energiezuständen in } [E, E+\Delta E]$$

wobei in diesem Problem die Energie diskrete Werte E_n annimmt. Der Hamiltonoperator der Spins (mit $S = \hbar/2$) laute $H = \mu_B B \sum_{i=1}^{N} \sigma_{z,i}$.

a) Wieviele und welche Energieniveaus E_n gibt es, und wie lautet der Energieabstand zwischen ihnen.

b) Zeigen Sie, dass die Anzahl von Spinzuständen zur Energie E_n (d.h. der Entartungsgrad) durch die Binomialkoeffizienten $N!/n!(N-n)!$ gegeben ist.
Hinweis: Siehe Aufgabe 4.

c) Damit $W = \frac{\Delta E}{2\mu_B B} \frac{N!}{n!(N-n)!}$ gesetzt werden kann, muss der Entartungsgrad (fast) konstant sein, wenn die Energie um ΔE variiert. Diskutieren Sie, wie ΔE gewählt werden kann.

d) Bestimmen Sie mit Stirlings Näherung $N! = N^N e^{-N} \sqrt{2\pi N}$ die Größen A und S (in führender Ordnung in N für Größe N) in folgendem Ausdruck:

$$W = A \Delta E \, e^{S/k_B}$$

Drücken Sie zuerst S durch n/N aus und substituieren Sie dann $r = \frac{E}{\mu_B B}$. Zeigen Sie, dass die Entropie $S(E,B,N)$ linear mit N anwächst, und skizzieren Sie S als Funktion von E.
Hinweis: Das Ergebnis kennen Sie von Aufgabe 11.

e) Aufgrund der Eingrenzung der Energien mit ΔE sind zwei verschiedene Spins a priori nicht unabhängig. Zeigen Sie, dass jedoch im Grenzfall Größe N, die Wahrscheinlichkeit zweier Spins i und j faktorisiert $p_2(\sigma_i, \sigma_j) = p_1(\sigma_i) p_1(\sigma_j)$. Wie lautet $p_1(\sigma)$?
Hinweis: Betrachten Sie zur Vereinfachung die Spins 1 und 2. Zeigen Sie zuerst, dass $p_1(\sigma_1 = +1) = W_+/W$, wobei W_+ die Anzahl aller Einstellungen von $N-1$ Spins ist, so dass die Energie in $[E_n - \mu_B B, E_n - \mu_B B + \Delta E]$ liegt. Drücken Sie $\ln p_1(\sigma_1 = +1)$ mit der Entropie S aus, und folgern Sie daraus, wie $\ln p_1(\sigma_1 = -1)$ lautet. Wiederholen Sie nun diese Rechnung für $p_2(\sigma_1 = +1, \sigma_2 = +1)$ und zeigen Sie, dass
$\ln p_2(+1, +1) = 2 \ln p_1(+1)$. Analoge Argumente gelten für die restlichen Wahrscheinlichkeiten von p_2.

f) Bestimmen Sie die Größe $\beta = \frac{1}{k_B} \partial S / \partial E$ als Funktion von E, B und N. Drücken Sie mit ihr das Verhältnis $p_1(\sigma_i = +1)/p_1(\sigma_i = -1)$ von Aufgabenteil e) aus und bestimmen Sie, unter Verwendung der Normierung, $p_1(\sigma_i)$ als Funktion von β und B.

schriftlich

17. **Brillouin Kurven (4 Punkte)**
Es sollen paramagnetische Salze beschrieben werden, in denen magnetische Momente mit Spinzahl $J > \frac{1}{2}$ vorliegen. Der Hamiltonoperator der N Spins im externen Magnetfeld laute:

$$H = g\mu_B B \sum_{i=1}^{N} s_i \qquad \text{mit den Eigenwerten von } s_i\text{: } -J, -J+1, \ldots, J-1, J$$

Verwenden Sie den kanonischen Dichteoperator und bestimmen Sie die Zustandsumme. Bestimmen Sie daraus die Magnetisierungskurven durch Differentation und auch die magnetische Suszeptibilität. Verifizieren Sie die bekannten Ergebnisse für $J = \frac{1}{2}$.

18. **Langevin Paramagnetismus (4 Punkte)**
Vor der Entdeckung der Quantenmechanik entwarf Langevin ein klassisches Modell zur Erklärung des Paramagnetismus. Er nahm an, dass jedes magnetische Molekül ein permanentes magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu}$ besitze, welches als Vektor frei rotieren könne. Für die Energie eines magnetischen Moments setzte er $E = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}$.

a) Von welchen Variablen hängt die Wahrscheinlichkeitsdichte eines einzelnen magnetischen Momentes ab und wie lautet sie in der kanonischen Gesamtheit? Wie lautet das geeignete 'Volumenelement' zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeit?

b) Bestimmen Sie die Zustandssumme von N unabhängigen magnetischen Momenten nach Langevin und leiten Sie daraus durch Differentiation die mittlere Magnetisierung und die magnetische Suszeptibilität ab. In welchem Grenzfall erkennen Sie die Ergebnisse aus Aufgabe 17 wieder, und welcher Unterschied bleibt jedoch auch in diesem Limes bestehen?

19. **Quantenmechanischer harmonischer Oszillator (6 Punkte)**

a) Bestimmen Sie für N unabhängige, entartete quantenmechanische Oszillatoren mit Hamiltonoperator

$$H = \hbar\omega \sum_{i=1}^{N} \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right)$$

in der kanonischen Gesamtheit bei Temperatur T die mittlere Energie $\langle E \rangle$, die Entropie $S = -k_B Sp \rho \ln \rho$ und die spezifische Wärme $C = \partial E / \partial T$.
Hinweis: Bestimmen Sie zuerst die Zustandssumme und daraus durch Differentiation die Energie. Damit kann der allgemeine Zusammenhang zwischen S, Z und $\langle E \rangle$ leicht umgeformt werden.

b) Wie lautet die Hamiltonfunktion der zugehörigen klassischen harmonischen Oszillatoren? Bestimmen Sie die Größen S, Z und $\langle E \rangle$ in der kanonischen Gesamtheit durch geeignete Integrationen im Phasenraum und vergleichen Sie klassische und quantenmechanische Ergebnisse (z.B. graphisch).

20. **Typische Zustände (4 Punkte)**
In einem thermodynamischen System mit diskreten Energiewerten E_n sei die Wahrscheinlichkeit eines Mikrozustandes gegeben durch die kanonische Verteilungsfunktion:

$$p_n = \frac{1}{Z}\, e^{-\beta E_n} \qquad \text{mit} \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

a) Schreiben Sie p_n mit Entropie S und mittlerer Energie $\langle E \rangle$ statt mit Z, indem Sie den allgemeinen Zusammenhang zwischen Z, $\langle E \rangle$ und S verwenden. Zeigen Sie damit, dass die Wahrscheinlichkeit für einen typischen Zustand, d.h. die Wahrscheinlichkeit der Besetzung eines Energieniveaus E_n, welches nahe an der mittleren Energie liegt $|E_n - \langle E \rangle| \leq N\epsilon$, in folgenden Grenzen liegt:

$$e^{-S/k_B - \beta N\epsilon} \leq p_n \leq e^{-S/k_B + \beta N\epsilon}$$

b) Zeigen Sie für die spezifische Wärme ($\beta = 1/k_B T$):

$$C = \partial E / \partial T = k_B \beta^2 \langle (E_n - \langle E \rangle)^2 \rangle = k_B \beta^2 \sum_n \left(E_n - \langle E \rangle\right)^2 p_n$$

c) Verwenden Sie, dass die spezifische Wärme extensiv ist und mit der Teilchenzahl skaliert, um zu zeigen, dass im thermodynamischen Grenzfall die untypischen Zustände verschwindendes Gewicht besitzen, d.h. $\sum_n' p_n \to 0$ dass die Summe der Wahrscheinlichkeiten alle Zustände, die nicht nahe an der mittleren Energie liegen (angedeutet durch $'$), gegen Null geht. Begründen Sie damit, dass im thermodynamischen Grenzfall alle typischen Zustände (fast) gleiche Wahrscheinlichkeit besitzen, und dass die Entropie die Anzahl der typischen Zustände misst.