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 2009/10

Übungsblatt 3, Ausgabe 10.11.2009, Abgabe und Besprechung am 16.11.2009

Präsenzaufgaben

12. **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 unnormierte Dichteoperator $\tilde{\rho} = e^{-\beta H}$.

(a) Wählen Sie eine geeignete Orthonormalbasis, in der $\tilde{\rho}$ diagonal ist. Wie lautet dann die Zustandssumme $Z = Sp\tilde{\rho}$? Ab jetzt werde $\rho = \frac{1}{Z}\tilde{\rho}$ verwendet.
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 $\langle n \rangle$. Berechnen Sie die Entropie $S = -k_B \, Sp(\rho \ln \rho)$ sowie die spezifische Wärme $C = \frac{\partial}{\partial T}\langle E \rangle$.

13. **Entartete harmonische Oszillatoren**
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.

(a) Wann beschreiben zwei harmonische Oszillatoren unabhängige Variablen?

(b) 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.

(c) 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 $(1-x)^{-2} = \sum_{m=0}^{\infty}(1+m)x^m$ und bestimmen Sie Z_2 auf zwei verschiedene Weisen.

schriftlich

14. **Virialtheorem (3 Punkte)**

    (a) Zeigen Sie für ein einzelnes Teilchen im eindimensionalen Fall, dass der Virialsatz

    $$Sp\left[\left(\frac{p^2}{m} - x\frac{\partial}{\partial x}V(x)\right)\rho\right] = 0$$

    für stationäre Dichteoperatoren ($d\rho/dt = 0$) gilt. V(x) ist das Potential.
    Hinweis: Gehen Sie von der Beziehung $Sp(px[H,\rho]) = 0$ aus. Wieso gilt diese?

    (b) Bestimmen Sie mit Hilfe des Virialsatzes das Verhältnis von mittlerer kinetischer und potentieller Energie

    i. beim harmonischen Oszillator,

    ii. bei Teilchen mit Coulomb- oder Gravitationswechselwirkung.

    (c) Nehmen Sie an, ein klassisches System, bei dem nur Gravitationskräfte wirken, sei im thermischen Gleichgewicht, d.h. es gelte $\langle p^2/(2m)\rangle = \frac{1}{2}k_BT$. Wie würde die Gesamtenergie von der Temperatur abhängen?

15. **Quantenmechanischer harmonischer Oszillator (4 Punkte)**
    Bestimmen und diskutieren 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 ($\rho = e^{-\beta H}/Z$) 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 Zustandsumme und daraus durch Differentiation die Energie.

16. **Brillouin Kurven (3 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 ($\rho = e^{-\beta H}/Z$) und bestimmen Sie die Zustandsumme. Bestimmen Sie daraus die Magnetisierungskurven durch Differentiation und auch die magnetische Suszeptibilität für $B = 0$. Verifizieren Sie die bekannten Ergebnisse für $J = \frac{1}{2}$ und $g = 2$.

17. **Zustandssumme des Zwei-Niveau-Systems (4 Punkte)**
    Die Funktion Z, die sich ergibt aus

    $$Z = Sp\ \exp(-\beta H)$$

    heißt Zustandssumme und ist eine der zentralen Größen der Statistischen Mechanik. β ist ein positiver Parameter, der die Temperatur widerspiegelt und H ist der Hamiltonoperator des Systems.

(a) Berechnen Sie Z auf *eine* der beiden unten beschriebenen Weisen für den Hamiltonoperator eines Zwei–Niveausystems,

$$H = -t\sigma_x - h\sigma_z.$$

- Verwenden Sie $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$, die Eigenschaft der Pauli Matrizen, und entwickeln Sie die Exponentialfunktion in einer Taylorreihe. *Hinweis:* Eine ähnliche Rechnung haben Sie im IK 4 in Aufgabe 43 e, Blatt 8 durchgeführt.
- Verwenden Sie die Eigenwertdarstellung von H.

(b) Diskutieren Sie die Funktion $Z(\beta, t, h)$.