Universität Karlsruhe SS 2004
Institut für Theorie der Kondensierten Materie
Prof. Dr. Peter Wölfle, Dr. Jan Brinckmann **02.06.04**
http://www.tkm.uni-karlsruhe.de/lehre janbri@tkm.uni-karlsruhe.de / Physikhochh. Zi. 10.13

Übungsblatt Nr. 7 zur Theorie F (Statistische Physik)

1 Spurberechnung:
Zeigen Sie, daß mit beliebigen Operatoren $\hat{A}\,,\hat{B}\,,\hat{C}$ gilt:

$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \sum_\alpha \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$ ist unabhängig von der Wahl der orthonormalen Basis $\{|\alpha\rangle\}$.

$\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$.

2 Zustandsoperator:
$\hat{W}_k$ ist der Zustandsoperator der kanonischen Gesamtheit. Überprüfen Sie die folgenden Aussagen:

a) $\mathrm{Tr}(\hat{W}_k) = 1$, $\hat{W}_k^\dagger = \hat{W}_k$, $\hat{W}_k = \sum_\alpha w_\alpha \hat{P}_\alpha$, $\hat{P}_\alpha^2 = \hat{P}_\alpha$;
wie lauten $\hat{P}_\alpha$, w_α , $\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{W}_k\,\hat{A})$?

b) Die innere Energie $U := \langle\hat{H}\rangle$ ist gegeben durch $U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z_k)$ $(\beta = 1/kT)$.
Die Entropie $S := -k\mathrm{Tr}(\hat{W}_k \ln[\hat{W}_k])$ folgt aus $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ mit $F = -kT\ln(Z_k)$.
Die freie Energie $F := U - T\,S$ ergibt sich aus $F = -kT\ln(Z_k)$.

3 Quantisierte Schallwellen (Phononen):
Ein Kristallgitter mit Volumen $V = L^3$ besteht aus N Atomen, die kleine Schwingungen um ihre Ruhelage ausführen können. Es gibt $3N$ Schallmoden in diesem Kristall, mit Eigenfrequenzen $\omega_\lambda(\mathbf{k})$, $\lambda = 1,2,3$, $k_\mu = \frac{2\pi}{L}n_\mu$, $n_\mu = 0, \pm1, \pm2, \ldots, \pm n_{max}$. Diese werden als $3N$ unabhängige harmonische Oszillatoren betrachtet.

a) Geben Sie den Hamiltonoperator $\hat{H}$ des Systems an, dessen Eigenzustände und die freie Energie (kanonische Gesamtheit). Vergleichen Sie mit dem idealen Bose-Gas.

b) **Debye-Modell:** Näherungsweise setzt man $\omega_\lambda(\mathbf{k}) = c_\lambda|\mathbf{k}|$ und $c_\lambda = c$ für alle $\mathbf{k}\,,\lambda$.
Zeigen Sie, daß die Zustandsdichte

$$\mathcal{N}(\varepsilon) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \hbar\omega(\mathbf{k})) \quad \text{gegeben ist durch} \quad \mathcal{N}(\varepsilon) = \frac{3N}{V}\frac{\varepsilon^2}{(\hbar\omega_D)^3}\Theta(\hbar\omega_D - \varepsilon)$$

Bestimmen Sie die Debye-Frequenz ω_D.
Hinweis: Welche Bedeutung hat $\int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon\,\mathcal{N}(\varepsilon)$?

c) Berechnen Sie $c_V(T,V,N)$ für $kT \ll \hbar\omega_D$ und $kT \gg \hbar\omega_D$.
Hinweis: Leiten Sie zunächst $U = E_0 + 3V\int_0^{\hbar\omega_D} \mathrm{d}\varepsilon\,\mathcal{N}(\varepsilon)\,\varepsilon\,g(\varepsilon)$ ab, und machen Sie darin geeignete Näherungen. Es gilt $\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\frac{x^3}{e^x-1} = \frac{\pi^4}{15}$.

d) **Einstein-Modell:** Befinden sich 2 Atome in jeder der N Einheitszellen des Gitters, so gibt es zusätzlich $3N$ (sog. optische) Schallmoden mit $\omega_\lambda(\mathbf{k}) = \omega_0$.
Man berechne deren Beitrag zu c_V für $kT \ll \hbar\omega_0$ und $kT \gg \hbar\omega_0$.

— Besprechung in den Übungsgruppen am Dienstag, 08.06.04 —