

Übungsblatt Nr. 8 zur Theorie F (Statistische Physik)

1 Zeitabhängiger Zustandsoperator:

Der Hamiltonoperator für einen Spin $S = 1/2$ in einem Magnetfeld $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ lautet

$$\hat{H} = \mu B \hat{S}_z, \quad \hat{S}_z |z\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |z\pm\rangle, \quad \langle z\pm | z\pm \rangle = 1, \quad \langle z\pm | z\mp \rangle = 0$$

a) Zur Zeit $t = 0$ sei der Spin in x -Richtung polarisiert,

$$|\psi(t=0)\rangle = |x+\rangle, \quad \hat{S}_x |x\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |x\pm\rangle$$

Geben Sie den Zustandsoperator $\hat{W}(t=0)$ an, in der Basis $\{|x\pm\rangle\}$ sowie in $\{|z\pm\rangle\}$.

Was ist die Entropie zur Zeit $t = 0$? Wie interpretieren Sie das Ergebnis?

b) Berechnen Sie mit Hilfe des Zeitentwicklers $\hat{U}(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t)$ den zeitabhängigen Zustandsoperator $\hat{W}(t)$, und damit $\langle \hat{S}_x \rangle(t)$, $\langle \hat{S}_y \rangle(t)$ und $\langle \hat{S}_z \rangle(t)$.

2 Thermische Ausdehnung eines Moleküls, Störungsrechnung:

Ein zweiatomiges Molekül, das in einem Kristall eingebettet ist, besitzt nur noch den Schwingungsfreiheitsgrad. Das Bindungspotential der Atome enthält einen anharmonischen Term $\sim \hat{x}^3$, der Hamiltonoperator lautet

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}^2, \quad \hat{V} = \alpha \hat{x}^3, \quad \hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad \langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}$$

Das Kristall wirkt als Wärmebad mit Temperatur T (kanonische Gesamtheit).

a) Berechnen Sie Zustandssumme Z_0 und freie Energie F_0 des ungestörten Systems $\hat{H}_0$.

Bestimmen Sie die Korrektur F_1 zur freien Energie in 1. Ordnung Störungstheorie.

$$F = F_0 + F_1 + F_2 + \dots, \quad F_1 = \langle \hat{V} \rangle_0 = \text{Tr}(\hat{W}_0 \hat{V}), \quad \hat{W}_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta \hat{H}_0}, \quad \beta = \frac{1}{kT}.$$

$$\text{Hinweis: } \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger).$$

b) In 1. Ordnung Störungstheorie ist ein thermischer Mittelwert gegeben durch

$$\text{Tr}(\hat{W} \hat{A}) = \text{Tr}(\hat{W}_0 \hat{A}) + \text{Tr}(\hat{W}_1 \hat{A}), \quad \hat{W}_1 = -\hat{W}_0 \int_0^\beta d\tau [\hat{V}_\tau - \langle \hat{V} \rangle_0], \quad \hat{V}_\tau = e^{\tau \hat{H}_0} \hat{V} e^{-\tau \hat{H}_0}$$

Gesucht ist die mittlere Ausdehnung $\langle \hat{x} \rangle = \text{Tr}(\hat{W} \hat{x})$ des Moleküls in 1. Ordnung.

Berechnen Sie $\text{Tr}(\hat{W}_0 \hat{x})$. Zeigen Sie dann zunächst, daß

$$\text{Tr}(\hat{W}_1 \hat{x}) = \left(\frac{1}{Z_0} \sum_{n,n'=0}^{\infty} \langle n' | \hat{V} | n \rangle \langle n | \hat{x} | n' \rangle \frac{e^{-\beta E_n}}{E_n - E_{n'}} \right) + (\text{komplex konjugiert})$$

c) Gewinnen Sie daraus $\text{Tr}(\hat{W}_1 \hat{x}) = -const. \cdot \frac{1}{Z_0} \sinh\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) \sum_{\bar{n}=0}^{\infty} \bar{n}^2 e^{-\beta \hbar\omega_0 \bar{n}}$

Die Summe kann ausgeführt werden.

Wie verläuft $\langle \hat{x} \rangle$ für $0 \leq T < \infty$ mit $\alpha < 0$ qualitativ?