

Übungsblatt Nr. 7 zur Theorie F (Statistische Physik)

- 1 Spurberechnung:** Zeigen Sie, daß mit beliebigen Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ gilt:
 $\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle$ ist unabhängig von der Wahl der orthonormierten Basis $\{|\alpha\rangle\}$;
 $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \text{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A})$.
- 2 Zustandsoperator:** $\hat{W}_K$ sei der Zustandsoperator der kanonischen Gesamtheit. Überprüfen Sie die folgenden Aussagen:
 a) $\text{Tr}(\hat{W}_K) = 1$, $\hat{W}_K^\dagger = \hat{W}_K$, $\hat{W}_K = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \hat{P}_{\alpha}$, $\hat{P}_{\alpha}^2 = \hat{P}_{\alpha}$;
 wie lauten $\hat{P}_{\alpha}$, w_{α} , $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{W}_K \hat{A})$?
 b) Innere Energie $U := \langle \hat{H} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z_K)$ ($\beta = 1/kT$).
 Entropie $S := -k \text{Tr}(\hat{W}_K \ln[\hat{W}_K]) = -\frac{\partial F}{\partial T}$ mit $F = -kT \ln(Z_K)$.
 Freie Energie $F := U - TS = -kT \ln(Z_K)$.
- 3 Zeitabhängiger Zustandsoperator:** Der Hamiltonoperator für einen Spin $S = 1/2$ in einem Magnetfeld $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ lautet
 $\hat{H} = \mu B \hat{S}_z$, $\hat{S}_z |z\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |z\pm\rangle$, $\langle z\pm | z\pm \rangle = 1$, $\langle z\pm | z\mp \rangle = 0$
 a) Zur Zeit $t = 0$ sei der Spin in x -Richtung polarisiert,
 $|\psi(t=0)\rangle = |x+\rangle$, $\hat{S}_x |x\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |x\pm\rangle$
 Bestimmen Sie den Zustandsoperator $\hat{W}(t=0)$, 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 $\langle \hat{S}_z \rangle(t)$.
- 4 Zustandssumme im klassischen Grenzfall:** In einem Volumen V befindet sich ein Gas aus N geladenen Teilchen (Ladung q , Masse m). Berechnen Sie den Effekt eines externen Magnetfeldes $\mathbf{B}$ auf die *klassische* kanonische Zustandssumme $Z_K(T, \mathbf{B})$. Was bedeutet das Ergebnis ?
- 5 Thermische Ausdehnung eines Moleküls, Störungsrechnung:** Ein zweiatomiges Molekül, das in ein Kristall eingebettet ist, besitzt nur noch einen Schwingungsfreiheitsgrad. Das Bindungspotential der Atome enthält einen anharmonischen Term $\sim \hat{x}^3$, der Hamiltonoperator lautet also, mit $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$,
 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}^2$, $\hat{V} = \alpha \hat{x}^3$, $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$, $\langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}$
 Das Kristall wirkt als Wärmebad mit der 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:
 $F = F_0 + F_1 + \dots$, $F_1 = \langle \hat{V} \rangle_0 = \text{Tr}(\hat{W}_0 \hat{V})$, $\hat{W}_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta \hat{H}_0}$, $\beta = \frac{1}{kT}$.

b*) In 1. Ordnung Störungstheorie ist ein thermischer Mittelwert $\langle \hat{A} \rangle$ 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 $\text{Tr}(\hat{W}_1\hat{x}) = -const. \cdot \frac{1}{Z_0} \sinh\left(\frac{\hbar\omega_0}{2kT}\right) \sum_{\bar{n}=1}^{\infty} \bar{n}^2 e^{-\beta\hbar\omega_0 \bar{n}}$,

und berechnen Sie die Summe.

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

* Weiterführende Teilaufgaben für Interessierte, keine Wertung.

— Besprechung in den Übungsgruppen am Dienstag, 12.06.07 —