

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 08PROF. DR. P. WÖLFLE
DR. M. GREITER**Blatt 7**
Besprechung 03.06.08**1. Berechnung der Spur**

(1 Punkt)

Zeigen Sie für beliebigen Operatoren $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$:

(i) $\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle$

ist unabhängig von der Wahl der orthonormierten Basis $\{|\alpha\rangle\}$.

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

2. Zustandsoperator

(2 Punkte)

 $\hat{W}_K$ sei der Zustandsoperator der kanonischen Gesamtheit. Überprüfen Sie die folgenden Aussagen auf Richtigkeit:

(a) $\text{Tr}(\hat{W}_K) = 1, \quad \hat{W}_K^\dagger = \hat{W}_K, \quad \hat{W}_K = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \hat{P}_{\alpha}, \quad \hat{P}_{\alpha}^2 = \hat{P}_{\alpha}.$

Wie lauten $\hat{P}_{\alpha}, w_{\alpha}, \langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\hat{W}_K \hat{A})$?(b) Innere Energie $U := \langle \hat{H} \rangle$:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z_K), \quad \text{wobei } \beta = 1/kT$$

Entropie $S := -k \text{Tr}(\hat{W}_K \ln[\hat{W}_K])$:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} \quad \text{mit } F = -kT \ln(Z_K)$$

Freie Energie $F := U - TS$:

$$F = -kT \ln(Z_K)$$

(je 1 Punkt)

3. Zeitabhängiger Zustandsoperator

(4 Punkte)

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

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

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

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

Bestimmen Sie den Zustandsoperator $\hat{W}(t=0)$ in den Basen $\{|x\pm\rangle\}$ und $\{|z\pm\rangle\}$.
Bestimmen Sie die Entropie zur Zeit $t=0$. Interpretieren Sie das Ergebnis.

- (b) Berechnen Sie mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators

$$\hat{U}(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)$$

den zeitabhängigen Zustandsoperator $\hat{W}(t)$, und damit $\langle\hat{S}_x\rangle(t)$, $\langle\hat{S}_y\rangle(t)$ und $\langle\hat{S}_z\rangle(t)$.

(je 2 Punkte)

4. Zustandssumme im klassischen Grenzfall (1 Punkt)

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 $Z_K(T, \mathbf{B})$. Interpretieren Sie das Ergebnis.

5. Thermische Ausdehnung eines Moleküls: Störungsrechnung (2 Punkte)

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

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2, \quad \hat{V} = \alpha\hat{x}^3$$

wobei

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{H}_0|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}.$$

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:

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

(2 Punkte)

Die folgenden Teilaufgaben sind weiterführende Aufgaben für Interessierte und gehen nicht in die Wertung ein:

(b) In 1. Ordnung Störungstheorie ist ein thermischer Mittelwert $\langle \hat{A} \rangle$ gegeben durch

$$\text{Tr}(\hat{W}\hat{A}) = \text{Tr}(\hat{W}_0\hat{A}) + \text{Tr}(\hat{W}_1\hat{A})$$

wobei

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

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

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

und berechnen Sie die Summe. Wie verläuft $\langle \hat{x} \rangle$ qualitativ im Bereich $0 \leq T < \infty$ für $\alpha < 0$?