

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 12**Prof. Dr. Jörg Schmalian**
Dr. Igor Gornyi**Blatt 8: 30 Punkte + 15 Bonuspunkte**
Besprechung 15.06.2012

1. Landauscher Diamagnetismus:**(30 Punkte)**

In dieser Übung betrachten Sie die diamagnetische Magnetisierung, die mit der Quantisierung der Bahnbewegung der Elektronen im Magnetfeld zusammenhängt.

Üblicherweise beschreibt man das äußere elektromagnetische Feld mit Hilfe des Vektorpotentials $\mathbf{A}$ und des skalaren Potentials φ .

Der Hamilton-Operator für ein Teilchen ohne Spin im Magnetfeld $\mathbf{H}$ hat die Gestalt

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2.$$

Wir wählen die Richtung des Magnetfeldes als z -Achse, d.h. $\mathbf{H} = (0, 0, H)$. Dann wählen wir das Vektorpotential $\mathbf{A}$ in der Coulomb-Eichung $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ als $\mathbf{A} = (-Hy, 0, 0)$.

Finden Sie jetzt die Energieniveaus:

(a) Schreiben Sie die Schrödinger-Gleichung. (2 Punkte)

(b) Verwenden Sie den folgenden Ansatz für die Wellenfunktion des Elektrons

$$\psi = \chi(y) \exp[i(p_x x + p_z z)/\hbar].$$

Leiten Sie eine Gleichung für die Funktion $\chi(y)$ her. (2 Punkte)

(c) Überprüfen Sie dass die Gleichung für die Funktion $\chi(y)$ die Gestalt der Schrödinger-Gleichung für einen linearen harmonischen Oszillator hat. Bestimmen Sie das Zentrum der Schwingung y_0 . Finden Sie die Eigenfrequenz des Oszillators und seine Energieniveaus. (2 Punkte)

(d) Bestimmen Sie jetzt die Energieniveaus des Elektrons in dem homogenen Magnetfeld.

Man bezeichnet diese Niveaus als Landau-Niveaus. (2 Punkte)

(e) Bemerken Sie, dass die erhaltenen Energieniveaus entartet sind. Finden Sie den Entartungsgrad der Energieniveaus. (4 Punkte)

Hinweis: Nehmen Sie an, dass die Bewegung auf ein großes aber endliches Volumen $V = L_x L_y L_z$ beschränkt ist. Die Zahl der möglichen (nunmehr diskreten) Werte von p_x im Intervall Δp_x ist $[L_x/(2\pi\hbar)]\Delta p_x$. Es sind aber nur die p_x -Werte zulässig, für die der Mittelpunkt y_0 innerhalb von der Fläche $S = L_x L_y$ in der $x - y$ Ebene liegt (hier vernachlässigen Sie den Bahnradius gegenüber dem großen L_y).

- (f) Für ein ideales Elektronengas im äußeren Magnetfeld schreiben Sie das großkanonischen Potential Ω als ein Integral über p_z und die Summe über die diskreten Energiewerte des Oszillators, d.h. über n . (5 Punkte)

Hinweis: Beachten Sie die Spinentartung!

- (g) Vereinfachen Sie den Ausdruck für Ω : bemerken Sie, dass man bei jedem gegebenen Wert n das effektive chemische Potential einführen kann. Leiten Sie den folgenden Ausdruck her

$$\Omega = 2\mu_B H \sum_{n=0}^{\infty} f[\mu - (2n+1)\mu_B H], \quad \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc},$$

und finden Sie die Funktion $f(\mu)$ als ein Integral über p_z . (4 Punkte)

- (h) Berechnen Sie die Summe über n mit Hilfe der bekannten Summationformel von Euler-McLaurin

$$\frac{1}{2}F(a) + \sum_{n=1}^{\infty} F(a+n) \approx \int_a^{\infty} dx F(x) - \frac{1}{12}F'(a).$$

Bemerken Sie, dass das erhaltene Integral unabhängig vom Magnetfeld ist. Überprüfen Sie das Ergebniss (4 Punkte)

$$\Omega = \Omega_0(\mu) - \frac{1}{6}\mu_B^2 H^2 \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2}.$$

- (i) Finden Sie die gesamte Suszeptibilität des Elektronengases. Ist das Gas para- oder diamagnetisch? (5 Punkte)

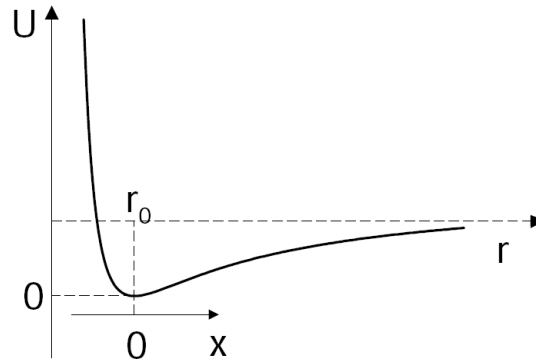
2. Bonusaufgabe: Anharmonischer Oszillator

(5 + 10 = 15 Punkte)

In einem zweiatomigen Molekül seien die Atome durch das gezeigte Potential U aneinander gebunden, wobei r den Abstand der Atome bezeichne. Außerdem sei das Molekül in ein Kristallgitter eingebunden, so daß keine Rotationsfreiheitsgrade auftreten. Für kleine Auslenkungen $x = r - r_0$ aus der Ruhelage r_0 kann U um r_0 entwickelt werden. Dann wird das Molekül durch den folgenden Hamilton-Operator beschrieben

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

mit der effektiven Masse m und der Eigenfrequenz ω_0 . Betrachten Sie V als kleine Störung. Der Ortsoperator x kann durch die Auf- und Absteigeoperatoren $a^\dagger$ und a ausgedrückt werden. 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:

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

- (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

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

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 $\alpha < 0$? Berechnen Sie den thermischen Ausdehnungskoeffizienten

$$\kappa = \frac{1}{r_0} \frac{\partial \langle x \rangle}{\partial T}.$$