Statistische Physik

Prof. Dr. Kurt Busch

SoSe 2017, Blatt 10a
20. Juni 2017

---

1. Zeitabhängiger Zustandsoperator (3+3 Punkte)

Der Hamilton-Operator eines Spin-1/2 Systems in einem Magnetfeld $\vec{B} = (0, 0, B)$ lautet

$$\hat{H} = \mu B \hat{S}_z.$$

Dabei ist μ das magnetische Moment des Spin-Systems und $\hat{S}_z$ der Spin-Operator in z-Richtung. Für die Eigenzustände $|z\pm\rangle$ von $\hat{S}_z$ gilt

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

(a) Zur Zeit $t = 0$ sei das Spin-System in x-Richtung polarisiert, d.h.

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

Geben Sie den Zustandsoperator $\hat{W}$ sowohl in der Basis $\{|z\pm\rangle\}$ als auch in der Basis $\{|x\pm\rangle\}$ an. Bestimmen Sie den Wert der Entropie zur Zeit $t = 0$. Interpretieren Sie das Ergebnis.

(b) Verwenden Sie den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)$ zur Bestimmung des zeitabhängigen Zustandsoperator $\hat{W}(t)$ und damit dann $\langle\hat{S}_x\rangle(t)$, $\langle\hat{S}_y\rangle(t)$ und $\langle\hat{S}_z\rangle(t)$.

– bitte wenden –

2. Thermische Ausdehnung eines Moleküls: Störungsrechnung (3+6 Punkte)

Ein zwei-atomiges Molekül, das in einem Kristall eingebettet ist, besitze nur noch einen Schwingungsfreiheitsgrad. Das Bindungspotential der Atome enhalte ferner einen anharmonischen Term, so dass der Hamilton-Operator lautet

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

Die Eigenzustände und Energieeigenwerte von $\hat{H}_0$ seien bekannt

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle \quad \text{mit } \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}.$$

Betrachten Sie die Wirkung des Kristalls als die eines Wärmebads mit Temperatur T (kanonische Gesamtheit).

(a) Berechnen Sie die Zustandsumme Z_0 sowie die freie Energie F_0 des ungestörten Systems $\hat{H}_0$.
Bestimmen Sie die Korrektur F_1 zur freien Energie in 1. Ordnung Störungstheorie

$$F_1 = \mathrm{Tr}\left\{\hat{W}_0 \hat{V}\right\} \quad \text{mit} \quad \hat{W}_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta \hat{H}_0} \text{ und } \beta = \frac{1}{kT}.$$

Hinweis: Verwenden Sie

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

(b) In 1. Ordnung Störungstheorie ist ein thermischer Mittelwert $\langle A\rangle$ gegeben durch (siehe Vorlesung)

$$\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\left\{\hat{W}\hat{A}\right\} = \mathrm{Tr}\left\{\hat{W}_0\hat{A}\right\} + \mathrm{Tr}\left\{\hat{W}_1\hat{A}\right\},$$
$$\hat{W}_1 = -\hat{W}_0 \int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \left(\hat{V}(\beta') - \langle V\rangle_0\right).$$

Gesucht ist die mittlere Ausdehnung $\langle x\rangle = \mathrm{Tr}\left\{\hat{W}\hat{x}\right\}$ des Moleküls in 1. Ordnung Störungstheorie.
Berechnen Sie zunächst $\mathrm{Tr}\left\{\hat{W}_0\hat{x}\right\}$ und zeigen Sie sodann, dass

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

Gewinnen Sie daraus

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

und führen Sie die Summe aus.
Wie verläuft $\langle x\rangle$ für $0 \le T < \infty$ für $\alpha < 0$ (Qualitative Betrachtung)?
